

**Entwicklung eines CFD-DEM-Verfahrens zur
numerischen Simulation der
Biomasseverbrennung und Ablagerungsbildung in
größtechnischen Rostfeuerungen**

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

der Fakultät für Maschinenbau und Schiffstechnik

der Universität Rostock

Vorgelegt von

M. Sc. Dorian Holtz

Lehrstuhl für Technische Thermodynamik

Rostock 2019



Dieses Werk ist lizenziert unter einer
Creative Commons Namensnennung - Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0
International Lizenz.

Erstgutachter: Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h. c. Egon Hassel
Lehrstuhl für Technische Thermodynamik
Universität Rostock

Zweitgutachter: Prof. Dr.-Ing. habil. Nikolai Kornev
Lehrstuhl für Modellierung und Simulation
Universität Rostock

Datum der Einreichung: 18.06.2019

Datum der Verteidigung: 24.09.2019

„Dem Geist sind keine Grenzen gesetzt außer denen, die wir als solche anerkennen.“

Napoleon Hill

Vorwort

Die vorliegende Arbeit ist in den Jahren 2015-2019 während meiner Assistenzzeit am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik der Universität Rostock entstanden. An dieser Stelle möchte ich verschiedenen Personen danken, ohne deren Zutun dieses Werk nicht zustande gekommen wäre.

An erster Stelle danke ich Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h. c. Egon Hassel und Herrn Dr.-Ing. Jürgen Nocke für die Möglichkeit an einem herausfordernden Thema zu arbeiten, für die Freiheit, welche mir zur Bewältigung der Problemstellung gegeben wurde und die Unterstützung zur Verfassung der Arbeit. Meine Wertschätzung gilt außerdem Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Nikolai Kornev für die Übernahme des Koreferats.

Ich möchte mich weiterhin bei der IBS Technik GmbH und der Stadtwerke Neustrelitz GmbH für die Bereitstellung der Anlagendaten und die Möglichkeit zur Besichtigung und Probenentnahme bedanken. Mein Dank gilt zudem Herrn Dr. Nils Engler vom Abfall- und Bioenergietechnikum der Universität Rostock für die Unterstützung bei der Brennstoffcharakterisierung. Ebenso möchte ich allen Kolleginnen und Kollegen meinen Dank aussprechen. Die tolle Arbeitsatmosphäre hat es mir stets leicht gemacht, täglich zur Arbeit zu gehen.

Nicht zuletzt danke ich meiner Familie, die mich auch in den schwierigeren Zeiten dieser Arbeit begleitet hat. Ohne ihre Unterstützung und Motivation wäre die Arbeit so nicht entstanden. Aus tiefstem Herzen danke ich insbesondere meiner Frau Nomio, die sämtliche Höhen und Tiefen dieser Arbeit mit mir gemeinsam durchlebte, mir stets Gehör schenkte und mir immer zur Seite stand.

Kurzfassung

Die Verbrennung fester Bioenergieträger stellt ein komplexes Zusammenspiel zahlreicher Phänomene dar. Verschiedene Wärme- und Stofftransportmechanismen sowie chemische Prozesse am Brennstoffpartikel, wie Pyrolyse oder heterogene Restkoksreaktionen, nehmen eine zentrale Rolle ein. Trotz jahrzehntelanger Forschung im Bereich der Verbrennung fester Bioenergieträger sind die gesamtheitlichen Vorgänge heute noch nicht im Detail verstanden. Insbesondere die großtechnische Erzeugung von Wärme und Strom durch die Verbrennung eines biogenen Festbrennstoffs ist häufig problembehaftet. An erster Stelle ist in diesem Zusammenhang die Entstehung von Ablagerungen an den Heizflächen der Dampferzeuger zu nennen. Sie sind ein Hauptgrund für unplanmäßige Anlagenstillstände und verursachen zum Teil erhebliche Kosten durch Reinigungs- und Reparaturmaßnahmen.

Die Anbackung von Flugasche ist als eine wesentliche Ursache der Beläge bekannt und gilt häufig als der dominierende Mechanismus bezüglich des Aufbaus massiver Ablagerungsstrukturen. Trotzdem sind einige Vorgänge bei der Depositionsentstehung in industriellen Anlagen bislang unklar. Mittels numerischer Simulation werden in der vorliegenden Arbeit die Verbrennung von Holz sowie Teilvorgänge bei der Belagsbildung durch Flugteilchen analysiert.

Zur Bearbeitung der Problemstellung wurde in dieser Arbeit eine neuartige Simulationethodik entwickelt, welche detaillierte Einblicke in die Verbrennungsprozesse großtechnischer Biomasserostfeuerungen erlaubt. Das Verfahren basiert auf einem kombinierten Ansatz aus numerischer Strömungssimulation (CFD) und der Diskrete Elemente Methode (DEM). Während Ersteres zur Auflösung des dreidimensionalen Strömungsfeldes dient, so findet die DEM Anwendung, um die Dynamik des granularen Materials zu behandeln. Zur Beschreibung der Verbrennungsprozesse des Festbrennstoffs wurde das Verfahren um Untermodelle für Stoff- und Wärmetransport sowie thermochemische Umwandlungsprozesse erweitert. Die Modelle für Trocknung, Pyrolyse und heterogene Restkoksreaktionen stehen in direkter Verbindung zum intrapartikulären Temperaturfeld, welches mit Hilfe eines eindimensionalen Ansatzes aufgelöst wird. Grundlage für das CFD-DEM-Konzept bietet das in ANSYS Fluent enthaltene Dense Discrete Phase Model (DDPM). Das eindimensionale Par-

tikelmodell wurde allerdings mit Hilfe von User-Defined Functions (UDF) in den Strömungslöser implementiert.

Eine umfassende Validierung des Verbrennungsmodells erfolgte mit Hilfe von experimentellen Daten aus der Literatur. Hierbei wurde zunächst die Funktionstüchtigkeit für die thermochemische Konversion einzelner Pappelholzteilchen überprüft. Anschließend wurde die gesamtheitliche Tauglichkeit der CFD-DEM-Prozedur an einem Festbett aus Buchenholzhackschnitzeln verifiziert. Sowohl für die Konversion eines einzelnen Holzteilchens als auch die Festbettverbrennung erreicht das Verfahren gute Übereinstimmung mit Messdaten.

Nachfolgend wurde erstmals eine solche CFD-DEM-Methode zur Untersuchung der Verbrennung und Ablagerungsbildung in einer industriellen Rostfeuerungsanlage eingesetzt. Hierzu wurde das Verbrennungsmodell durch einen stochastischen Ansatz zur Berechnung der Partikelhaftungsneigung erweitert. Das mit Hilfe der Simulation erzeugte Belagsbild korreliert insgesamt gut mit den Beobachtungen aus der Referenzanlage und bietet Erklärungsansätze für die örtliche Ausprägung der Belagsstruktur. Des Weiteren konnte mittels Simulation festgestellt werden, dass die Partikelfracht der Pyrolyse- und Koksausbrandzone des Rostes entstammt. In Abhängigkeit des Konversionsfortschritts des Holzes wird aus dem Brennstoffbett eine Mischung aus trockenen Holzpartikeln, Koks- und Ascheteilchen emittiert. Während des Aufenthalts im Rauchgas werden brennbare Bestandteile fast restlos zu Asche konvertiert. Im Laufe der Primär- und Sekundärverbrennung überschreitet die Partikelfracht nahezu vollständig den Erweichungspunkt der Asche aufgrund insgesamt sehr hoher Prozesstemperaturen. Dies ist als Hauptgrund für die gravierende Belagsbildung im betrachteten Referenzsystem anzusehen.

Basierend auf der numerischen Analyse wurden abschließend verschiedene Ansätze für eine Entschärfung der Belagsproblematik abgeleitet. Hierzu zählt unter anderem die Absiebung des ablagerungsrelevanten Brennstofffeinanteils vor der Feuerung. Außerdem kann die Applikation einer besser wärmeleitenden Feuerfestauskleidung dazu beitragen massive Beläge zu vermeiden. Gleiches gilt für eine ablagerungsreduzierende Betriebsweise. Hier ist vor allem eine weite Spreizung der Primärluftzugabe, eine vollständige Ausnutzung der Rostlänge und Vermeidung hoher Gasgeschwindigkeiten im Koksausbrand aufzuführen, um die Partikelemission aus dem Bett einzudämmen und die Belagsbildung einzugrenzen.

Abstract

Solid biofuel combustion is a complex process resulting from the interplay of innumerable phenomena. Heat and mass transfer, drying, pyrolysis and char burnout play a major role, to only name a few. Despite extensive research on biofuel combustion, the process itself is not yet entirely understood. Particularly, energy production in large-scale applications is often accompanied by uncontrolled effects. First of all, the formation of deposits on heat exchanger surfaces is a critical issue often leading to unscheduled shut-downs. Due to larger downtime, necessary cleaning and maintenance services deposits are a central driver of increased operational costs in many power plants.

Fly ash particle adherence is well known as the dominating mechanism with regard to deposit build-up in biomass grate firing systems. However, some underlying processes are still unknown. In this thesis biomass packed bed combustion, fine particle emission from the fuel bed, the transport of the fines as well as fine particle's influence on deposit formation are studied using numerical simulation.

In order to investigate biomass combustion and deposit formation in large-scale grate furnace, a new simulation methodology has been developed. Therefore, a combined approach of CFD and Discrete Element Method (DEM) has been used. While the former has been utilised for resolution of the three-dimensional flow field, the latter has been applied for the dynamics of the granular material. In order to consider movement and combustion of individual biofuel particles, the discrete particle method has been extended by submodels for heat and mass transfer and relevant conversion processes, namely drying, pyrolysis and char burnout. In that context, a one-dimensional approach has been used to resolve intra-particle gradients of thermally thick fuel components. The CFD-DEM concept is based on ANSYS Fluent's Dense Discrete Phase Model (DDPM). However, the particle model has been integrated to the flow solver via multiple User-Defined Functions (UDF). The CFD-DEM procedure has been comprehensively validated using literature data of poplar wood particle conversion and packed bed combustion of beech wood chips. Both, single particle as well as packed bed simulation have achieved good agreement with experimental data.

Thereafter, the validated CFD-DEM simulation technique has been applied to an industrial biomass grate furnace. For the first time, deposit formation in such a grate firing system has been studied to greater extend using a CFD-DEM concept. In this context, the combustion model has been extended by a viscosity approach for the description of particle sticking propensity. Simulation results of the deposit structure are in good agreement with observations from the reference system. Furthermore, simulation indicates that particles transported with flue gas originate from the pyrolysis and char burnout region on the grate. This effect is caused by an adverse combination of light particulate material and high primary air supply in this areas. The emitted particulates consist of dry wood, char and pure ash particles. However, partially converted fuel particles are more or less completely consumed to ash during flight. As a result of high process temperatures, almost all emitted particles exceed the ash softening level during their pathway through primary and secondary combustion zone. This is considered the major reason of high deposit formation rates in the reference plant.

On the basis of numerical analysis, approaches for deposit reduction have been derived finally. On one side, removal of fuel fine fraction prior to combustion can help reducing deposit relevant particle load in the flue gas markedly. On the other side, utilisation of an improved refractory lining might help preventing process temperature peaks and high deposition rates. Likewise, a deposit focussed system operation would contribute to reduce massive deposit formation. Especially, a wider primary air spread due to usage of the entire grate length can avoid high gas velocities in char burnout region and might thus diminish particle emission and deposit build-up.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	V
Abstract	VII
Abbildungsverzeichnis	XIV
Tabellenverzeichnis	XV
Abkürzungsverzeichnis	XVI
Symbolverzeichnis	XVII
Lateinische Symbole	XVII
Griechische Symbole	XXI
Dimensionslose Kennzahlen	XXII
1 Einführung	1
1.1 Energie aus Biomasse	1
1.2 Motivation und Zielsetzung dieser Arbeit	3
2 Grundlagen zur Verbrennung fester Bioenergieträger	5
2.1 Zusammensetzung holzartiger Brennstoffe	5
2.2 Thermochemische Konversion	8
2.2.1 Trocknung	8
2.2.2 Pyrolyse	9
2.2.3 Heterogene Koksreaktionen	10
2.3 Feuerungskonzepte	14
3 Ablagerungsentstehung	16
3.1 Freisetzung und Transport von Asche	18
3.2 Anhaftung von Partikeln	21
3.3 Heterogene Kondensation	24
3.4 Chemische Reaktionen	24

4 Literaturüberblick zur Simulation von Biomassefeuerungen	26
4.1 CFD-Simulation der freien Strömung	27
4.2 Behandlung des Festbettes mittels Euler-Euler-Methode	29
4.3 Behandlung des Festbettes mittels Euler-Lagrange-Ansatz	30
4.4 Modellierung der Verbrennungsprozesse am Einzelpartikel	33
4.5 Numerische Simulation der Ablagerungsbildung	37
4.6 Fazit	40
5 Methodik	42
5.1 Partikelbewegung	43
5.1.1 Widerstandskraft	44
5.1.2 Auftrieb und Gravitation	45
5.1.3 Partikelkontaktkräfte (DEM)	45
5.2 Partikelmodell	48
5.2.1 Bilanzgleichungen	50
5.2.2 Externer Wärmetransport	52
5.2.3 Externer und intrapartikulärer Stofftransport	55
5.2.4 Modellierung der Brennstofftrocknung	57
5.2.5 Pyrolysemodell	59
5.2.6 Modellierung heterogener Restkoksreaktionen	62
5.3 Gasphase	64
5.3.1 Bilanzgleichungen der Gasphase	64
5.3.2 Turbulenzmodellierung	66
5.3.3 Homogene Gasphasenreaktionen	67
5.4 Wärmestrahlung	69
5.5 Modellierung der Depositionsentstehung	70
5.6 Implementierung und Lösungsprozedur	75
5.7 Fazit	77
6 Validierung	78
6.1 Konversion eines einzelnen Holzteilchens	78
6.1.1 Pyrolyse	79
6.1.2 Verbrennung	86
6.2 Festbettverbrennung	90
6.3 Fazit	98

7 Simulation einer großtechnischen Biomasserostfeuerung	99
7.1 Brennstoffanalysen	100
7.2 Geometrie und Rechengitter	102
7.3 Simulationskonfiguration	104
7.4 Simulationsergebnisse	106
7.4.1 Brennstoffbett	106
7.4.2 Gasphase	111
7.4.3 Partikelflug und Ablagerungsbildung	116
7.5 Schlussfolgerungen für den Anlagenbetrieb	125
8 Zusammenfassung und Ausblick	127
Literaturverzeichnis	XLIII
Anhang	XLV
A-1 Pyrolysemodell	XLV
A-2 Depositionsmodell	XLVI
A-3 Verwendete Makros	XLVIII
A-4 Überhitzermodell	XLVIII

Abbildungsverzeichnis

1.1	Stromerzeugung aus Biomasse (links) und Wärmebereitstellung aus allen erneuerbaren Energien (rechts) 2017 in Deutschland	2
2.1	Zusammensetzung von Holz	6
2.2	Typische Pyrolyserate von Holz und dessen Makroverbindungen . . .	10
2.3	Teilvorgänge heterogener Restkoksreaktionen	11
2.4	Schematische Darstellung unterschiedlicher Feuerungssysteme	14
3.1	Ablagerungen in einer Biomasserostfeuerungen nach 6 monatiger Betriebszeit	16
3.2	Gemessene Größenverteilung von Flugaschepartikeln	20
3.3	Typische Erscheinungsbilder des Probenkörpers während der Analyse des Ascheschmelzverhaltens nach DIN CEN/TS 15 370-1	22
3.4	Bekannte Mechanismen von Korrosion an Wärmeübertragerrohren . .	25
4.1	Schematische Darstellung der CFD-Simulationen einer Rostfeuerung unter Gebrauch eines Festbettmodells	27
4.2	Diskretisierungsschema für ein zylindrisches Holzpartikel	35
5.1	Lineares Feder-Dämpfermodell für die Normalkraftberechnung	46
5.2	Schematische Darstellung des 1D-Partikelmodells zur Behandlung von Verbrennungsvorgängen an Holzteilchen	48
5.3	Reaktionsschema für Primär- und Sekundärpyrolyse	60
5.4	Haftwahrscheinlichkeit eines Partikels	73
5.5	Berechnungsablauf innerhalb des Partikelmodells	76
6.1	Schematische Darstellung des Einzelpartikelreaktors	79
6.2	Vergleich von Messung und Simulation für die Pyrolyse eines Pappelteilchens in Stickstoff ($d_p = 9,5 \text{ mm}$, $l_p = 9,5 \text{ mm}$ und 40 Ma.-% Wasser)	80
6.3	Vergleich von Messung und Simulation für die Pyrolyse eines Pappelteilchens in Stickstoff ($d_p = 9,5 \text{ mm}$, $l_p = 9,5 \text{ mm}$ und 6 Ma.-% Wasser)	82

6.4	Vergleich von Messung und Simulation für die Pyrolyse eines Pappelteilchens in Stickstoff ($d_p = 9,5$ mm, $l_p = 38$ mm und 40 Ma.-% Wasser)	84
6.5	Vergleich von Messung und Simulation für die Pyrolyse eines Pappelteilchens in Stickstoff ($d_p = 9,5$ mm, $l_p = 38$ mm und 6 Ma.-% Wasser) .	85
6.6	Kontur von Temperatur, H_2O -, CO - und CH_4 -Massenanteil in der umliegenden Gasphase eines verbrennenden Pappelteilchens zu unterschiedlichen Zeitpunkten	87
6.7	Normierte Massenanteile von Wasser, Holz, Koks und Asche während der Verbrennung eines Pappelteilchens	88
6.8	Vergleich von Messung und Simulation für die Verbrennung eines Pappelteilchens mit Luft ($d_p = 9,5$ mm, $l_p = 9,5$ mm und 40 Ma.-% Wasser)	89
6.9	Schematische Darstellung des Festbettreaktors	91
6.10	Wassermassenanteil der Partikel bei unterschiedlichen Zeitpunkten . .	93
6.11	Holzmassenanteil der Partikel bei unterschiedlichen Zeitpunkten . . .	94
6.12	Koksmassenanteil der Partikel bei unterschiedlichen Zeitpunkten . . .	95
6.13	Vergleich von Messung und Simulation für die Festbettverbrennung von Buchenholzhackgut ($d_p = 7,0$ mm und 30 Ma.-% Wasser)	97
7.1	Außenansicht des Biomasseheizkraftwerkes der Stadtwerke Neustrelitz GmbH	99
7.2	Holzhackgutprobe aus der Referenzanlage	100
7.3	Gemessene Partikelgrößenverteilung der Hackschnitzelprobe	101
7.4	3D CAD-Modell und Rechengitter von Feuerung und Dampferzeuger der Referenzanlage	102
7.5	Primärluftverteilung (Primär- + Rezuluft unter Rost)	104
7.6	Partikel-Paketkonfiguration für die Simulation der industriellen Referenzanlage	105
7.7	Massenanteil von Wasser der im Brennstoffbett befindlichen Partikel	106
7.8	Massenanteile von Hemicellulose, Cellulose und Lignin der im Brennstoffbett befindlichen Partikel	107
7.9	Massenanteil von Koks der im Brennstoffbett befindlichen Partikel . .	108
7.10	Oberflächentemperatur der im Brennstoffbett befindlichen Partikel . .	109
7.11	Biot- und Sparrow-Zahl der im Brennstoffbett befindlichen Partikel .	110
7.12	Konversionsstufe auf der Oberfläche der im Brennstoffbett befindlichen Partikel	111

7.13	Massenanteile verschiedener Gasspezies im Feuerraum und dem ersten Rauchgaszug der Referenzanlage, dargestellt auf einer Ebene durch die Kesselmitte	112
7.14	Verbrennungsraten von Teer, Wasserstoff, Methan und Kohlenstoffmonoxid auf einer Ebene durch die Mitte der Referenzanlage	114
7.15	Temperaturfeld im Referenzsystem auf zwei Ebenen	115
7.16	Partikeltrajektorien in der Referenzanlage, eingefärbt über den Massenanteil von Holz (a) und Koks (b) sowie Partikeltemperatur (c) und Partikeltemperatur im Vergleich zur Erweichungstemperatur T_s (d) . . .	117
7.17	Spezifische Bildungsrate von Ablagerungsstrukturen in der holzhackgutgefeuerten Referenzanlage	119
7.18	Errechnete Ablagerungsdicke in der Referenzanlage nach einer Betriebszeit von etwa 6 Monaten und Aufnahmen der realen Ablagerungsstruktur nach derselben Betriebsdauer	122
7.19	Eine vom Durchtrittsgitter abgelöste Wechte mit oberflächlicher Schmelzbildung und Zusammenlagerung einzelner Partikel im Inneren	124
A-1	Pyrolyserate von Holz mit originalen Kinetikparametern und mit adaptierten Werten	XLVI

Tabellenverzeichnis

2.1	Ausgewählte Merkmale unterschiedlicher Feuerungsarten	15
5.1	Materialeigenschaften der Partikelspezies	52
5.2	Modellparameter für Primär- und Sekundärpyrolyse	61
5.3	Massenanteile verschiedener Spezies innerhalb der Pyrolysegase	62
5.4	Kinetikparameter der heterogenen Koksreaktionen	64
5.5	Kinetikparameter für homogene Gasphasenreaktionen	68
5.6	Aschekomposition der Referenzprobe	72
5.7	Ascheschmelzverhalten der Referenzprobe	73
7.1	Immediatanalyse der Brennstoffprobe wie erhalten	100
7.2	Qualitätsmerkmale des Berechnungsgitters	103
7.3	Modellparameter für die DEM-Berechnung	105
7.4	Vergleich von Simulation und Beobachtungen aus dem Referenzsystem anhand der Schichtdicke gravierender Wechtenstrukturen	121
A-1	Modellparameter für die Pyrolyse der Hemicellulose	XLV
A-2	Konstanten des Ablagerungsmodells	XLVII
A-3	Hauptmakros zur Umsetzung des Simulationskonzeptes	XLVIII

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Erläuterung
CFD	Computational Fluid Dynamics
DDPM	Dense Discrete Phase Model
DEM	Diskrete Elemente Methode
DOM	Discrete Ordinates Model
DPM	Discrete Phase Model
DTG	Difference Thermogravimetry
EDM	Eddy-Dissipation Model
EEG	Erneuerbare-Energien-Gesetz
FBF	Festbettfeuerung
HW	Heizwerk
HKW	Heizkraftwerk
KTGF	Kinetische Theorie granularer Fluide
MHKW	Müllheizkraftwerk
SF	Staubfeuerung
SIM	Sharp Interface Model
SWSF	Stationäre Wirbelschichtfeuerung
UDF	User-Defined Function
WSGGM	Weighted-Sum-of-Gray-Gases-Model
XDEM	eXtended Discrete Element Method
ZWF	Zirkulierende Wirbelschichtfeuerung

Symbolverzeichnis

Lateinische Symbole

Symbol	Einheit	Erläuterung
a, b, c	-	Modellkonstanten Widerstandsbeiwert
A		Präexponentieller Faktor (Arrhenius-Ansatz)
A_{Asche}	-	Modellkonstante (Ablagerungsmodell)
a_{Asche}	Ma.-%	Modellkonstante (Ablagerungsmodell)
$a_{\varepsilon, f}$	m^{-1}	Äquivalenter Absorptionskoeffizient des Fluides
$a_{\varepsilon, p}$	m^{-1}	Äquivalenter Absorptionskoeffizient der Partikel- fracht
A_K	m^2	Koksoberfläche
A_{Mag}	-	Modellkonstante (Eddy-Dissipation Modell)
a_p	m^{-1}	Volumetrische Oberfläche
A_p	m^2	Partikeloberfläche bzw. projizierte Fläche
B_{Asche}	-	Modellkonstante (Ablagerungsmodell)
B_{Mag}	-	Modellkonstante (Eddy-Dissipation Modell)
c_D	-	Widerstandsbeiwert
$c_{f, \text{H}_2\text{O}}$	kmol m^{-3}	Wasserdampfkonzentration im umgebenden Fluid
$c_{p, \text{H}_2\text{O}}$	kmol m^{-3}	Wasserdampfkonzentration im Partikel
$c_{f, i}$	kmol m^{-3}	Eduktkonzentration im umgebenden Fluid
$c_{p, i}$	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	Spezifische Wärmekapazität einer Fluidspezies bei konstantem Druck
C_{pm}	m^{-1}	Trägheitsverlustfaktor (Überhitzermodell)
$c_{p, p}$	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	Spezifische Wärmekapazität des Partikels bei kon- stantem Druck
D_{eff}	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Effektiver Diffusionskoeffizient
D_i	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Diffusionskoeffizient einer Gasspezies (molekulare Diffusion und Knudsen-Diffusion)

(wird fortgesetzt)

Symbol	Einheit	Erläuterung
$D_{i,m}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Mittlerer molekularer Diffusionskoeffizient einer Gasspezies
$D_{i,\text{Kn}}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Koeffizient für Knudsen-Diffusion
d_p	m	Partikeldurchmesser
d_{Pore}	m	Porendurchmesser
d_r	m	Rohrdurchmesser (Überhitzermodell)
E_a	kJ mol^{-1}	Aktivierungsenergie (Arrhenius-Ansatz)
E_p	W m^{-3}	Äquivalente Partikelstrahlung
f_a	-	Korrekturfaktor für konvektive Wärmeübertragung
\vec{F}_C	N	Resultierende Kontaktkraft
\vec{F}_D	N	Widerstandskraft
f_l	-	Verlustfaktor
\vec{F}_{Diss}^n	N	Dissipativer Anteil der Normalkraft
\vec{F}_{El}^n	N	Elastischer Anteil der Normalkraft
f_p	-	Streufaktor
\vec{F}_G	N	Gewichtskraft
$\vec{F}_{i,j}$	N	Kontaktkraft eines binären Stoßes
$\vec{F}_{i,j}^n$	N	Normalkraft eines binären Stoßes
$\vec{F}_{i,j}^t$	N	Tangentialkraft eines binären Stoßes
\vec{F}_P	N	Partikelkraft
\vec{F}_p	N m^{-3}	Partikelimpulsquellterm
\vec{F}_{pm}	N m^{-3}	Impulsquellterm (Überhitzermodell)
\vec{g}	m s^{-2}	Erdbeschleunigung
h_f	J kg^{-1}	Spezifische Gasenthalpie
$h_{f,i}$	J kg^{-1}	Spezifische Gasspeziesenthalpie
\dot{h}_p	W m^{-3}	Enthalpiequellterm
I	W m^{-2}	Strahlungsintensität
\vec{J}_i	$\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$	Diffusionsstrom
k_C	s^{-1}	Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizient der Cellulose
k_K	m s^{-1}	Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizient des Kokeses
k_n	N m^{-1}	Federsteifigkeit

(wird fortgesetzt)

Symbol	Einheit	Erläuterung
k_t	$\text{m}^2 \text{s}^{-2}$	Turbulente kinetische Energie
l_{BS}	–	Bedarf an Oxidationsmittel
l_p	m	Partikellänge bzw. charakteristisches Maß
M	kmol kg^{-1}	Molare Masse
m_p	kg	Partikelmasse
\dot{m}_p	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Massentransferquellterm
$\dot{m}_{p,i}$	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Speziestransferquellterm
m_{pp}	kg	Partikelpaketmasse
m_r	kg	Reduzierte Masse
n_B	-	Brechungsindex
$\vec{n}_{i,j}$	-	Einheitsvektor in Normalenrichtung
p	Pa	Druck
p_{Haft}	-	Haftwahrscheinlichkeit
p_p	-	Partikelhaftwahrscheinlichkeit
p_s	Pa	Sättigungsdampfdruck
p_w	-	Wandhaftwahrscheinlichkeit
\dot{q}_α	W m^{-2}	Dichte des konvektiven Wärmestroms
\dot{Q}_α	W	Konvektiver Wärmestrom
\dot{q}_ε	W m^{-2}	Dichte des Strahlungswärmestroms
$\dot{q}_{f,\varepsilon}$	W m^{-3}	Strahlungsquellterm
\dot{Q}_ε	W	Strahlungswärmestrom
\dot{q}_p	W m^{-3}	Partikelwärmequellterm
\dot{q}_{pm}	W m^{-3}	Energiequellterm (Überhitzermodell)
R	$\text{J kmol}^{-1} \text{K}^{-1}$	Universelle Gaskonstante
\dot{r}_C	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Umwandlungsrate der Cellulose
\dot{r}_H	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Umwandlungsrate der Hemicellulose
$\dot{r}_{\text{H}_2\text{O}}$	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Trocknungsrate
\dot{r}_K	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Koksumwandlungsrate
\dot{r}_{Kin}	s^{-1}	Reaktionsrate der Mikrokinetik
$\dot{r}_{\text{Kin,CO}}$	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Kinetische Rate der CO-Verbrennung (Analog für H_2 , CH_4 und Teer)

(wird fortgesetzt)

Symbol	Einheit	Erläuterung
\dot{r}_L	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Umwandlungsrate des Lignins
\dot{r}_n	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Thermochemische Umwandlungsrate
$\dot{r}_{n,i}$	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Umwandlungsrate einer Partikel- bzw. Gasspezies
r_p	m	Partikelradius
r_{pp}	m	Partikelpaketradius
\dot{r}_{Turb}	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Rate turbulenter Durchmischung
t	s	Zeit
t_C	s	Kontaktdauer
$\vec{t}_{i,j}$	-	Einheitsvektor in Tangentialrichtung
T_a	K	Aktivierungstemperatur
T_ε	K	Strahlungstemperatur
T_f	K	Fluidtemperatur
T_p	K	Partikeltemperatur
T_S	K	Erweichungstemperatur
T_V	K	Verdampfungstemperatur
\vec{v}_f	m s^{-1}	Fluidgeschwindigkeit
$v_{f,\text{leer}}$	m s^{-1}	Leerrohrgeschwindigkeit
$\vec{v}_{n,i,j}$	-	Normalanteil Relativgeschwindigkeit
\vec{v}_p	m s^{-1}	Partikelgeschwindigkeit
V	m^3	Volumen
V_p	m^3	Partikelvolumen
$w_{\text{Al}_2\text{O}_3}$	Ma.-%	Massenanteil Al_2O_3 (Ablagerungsmodell)
w_{Bs}	-	Brennstoffmassenanteil (Eddy-Dissipation Modell)
w_{CaO}	Ma.-%	Massenanteil CaO (Ablagerungsmodell)
$w_{f,i}$	-	Gasspeziesmassenanteil
$w_{\text{Fe}_2\text{O}_3}$	Ma.-%	Massenanteil Fe_2O_3 (Ablagerungsmodell)
w_{MgO}	Ma.-%	Massenanteil MgO (Ablagerungsmodell)
$w_{p,i}$	-	Partikelspeziesmassenanteil
w_{Pro}	-	Produktmassenanteil (Eddy-Dissipation Modell)
w_{Ox}	-	Sauerstoffmassenanteil (Eddy-Dissipation Modell)
w_{SiO_2}	Ma.-%	Massenanteil SiO_2 (Ablagerungsmodell)

(wird fortgesetzt)

Symbol	Einheit	Erläuterung
X_{Koks}	-	Koksanteil
\vec{x}_{p}	m	Partikelposition
\vec{x}_{pp}	m	Partikelpaketposition

Griechische Symbole

Symbol	Einheit	Erläuterung
α	$\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$	Wärmeübergangskoeffizient
α_{f}	-	Volumenanteil der kontinuierlichen Phase
α_{pm}	m^2	Permeabilität (Überhitzermodell)
β	m s^{-1}	Stoffübergangskoeffizient
β_{T}	[-]	Temperaturkoeffizient
δt_{p}	s	Partikelzeitschritt
Δh_{R}	J kg^{-1}	Reaktionsenthalpie
Δh_{V}	J kg^{-1}	Verdampfungsenthalpie
γ_{n}	kg s^{-1}	Dämpfungskonstante
$\delta_{i,j}$	m	Überlappung zwischen zwei Partikeln
ε_{p}	-	Emissionskoeffizient eines Partikels
ϵ_{p}	-	Porosität eines Partikels
ϵ_{t}	$\text{m}^2 \text{s}^{-3}$	Turbulente Dissipationsrate
η	-	Restitutionskoeffizient
κ	-	Koeffizient der Phasenfunktion
λ_{f}	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	Wärmeleitfähigkeit des Fluides
$\lambda_{\text{f,eff}}$	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	Effektive Wärmeleitfähigkeit des Fluides
λ_{p}	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	Wärmeleitfähigkeit des Partikelmateriale
$\lambda_{\text{p,eff}}$	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	Effektive Wärmeleitfähigkeit des Partikels
$\bar{\lambda}_{\text{p}}$	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	Mittlere Wärmeleitfähigkeit des Partikelmateriale
λ_{ε}	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	Strahlungsanteil des Wärmetransportes
μ_{a}	Pa s	Viskosität der Asche (Ablagerungsmodell)
$\mu_{\text{a,Krit}}$	Pa s	Kritische Viskosität der Asche (Ablagerungsmodell)
μ_{f}	Pa s	Dynamische Viskosität des Fluides

(wird fortgesetzt)

Symbol	Einheit	Erläuterung
$\mu_{p,r}$	-	Reibungsbeiwert
μ_t	Pa s	Turbulente Viskosität
ν_i	-	Diffusionsvolumen einer Gasspezies
ρ_C	kg m ⁻³	Dichte Cellulose
$\rho_{C,a}$	kg m ⁻³	Dichte aktivierte Cellulose
ρ_f	kg m ⁻³	Fluiddichte
ρ_p	kg m ⁻³	Partikeldichte
σ_B	W m ⁻² K ⁻⁴	Stephan-Boltzmann-Konstante
$\sigma_{\varepsilon,p}$	m ⁻¹	Äquivalenter Streukoeffizient der Partikelphase
τ_p	-	Tortuosität der Porenstruktur
$\bar{\bar{\tau}}_f$	N m ⁻²	Spannungstensor
Φ	-	Phasenfunktion
Ω	-	Stöchiometriefaktor Koksreaktionen
Ω'	-	Raumwinkel der gestreuten Strahlung

Dimensionslose Kennzahlen

Symbol	Erläuterung
Bi	Biot-Zahl
Nu	Nusselt-Zahl
Pr	Prandtl-Zahl
Re	Reynolds-Zahl
Sc	Schmidt-Zahl
Sh	Sherwood-Zahl
ϕ	Thiele-Modul

1 Einführung

Die zukünftige Sicherstellung der Energieversorgung ist vor dem Hintergrund eines wachsenden Energiebedarfs und der Verknappung fossiler Energieträger eine zentrale Fragestellung der heutigen Zeit. Beeinflusst wird die Energiesituation zudem durch verschiedene politische Bestrebungen der vergangenen Dekaden, wie dem Ausstieg aus der Atomenergie sowie dem aufgrund klima- und umwelttechnischer Aspekte kürzlich beschlossenen Abbau der Kohleenergie. Mit der Einführung des Erneuerbare-Energien-Gesetzes (EEG) [1] wurde ab dem Jahr 2000 in Deutschland außerdem verstärkt der Ausbau nachhaltiger Energiequellen gefördert, um CO_2 einzusparen und fossile Ressourcen zu schonen. Unter die Förderung des EEG fallen Wasserkraft, Windkraft und Solarenergie sowie Geothermie und Energie aus Biomasse. Mit dem EEG soll bis 2020 ein Anteil erneuerbarer Energien von mindestens 18 % des Bruttoendenergieverbrauchs der Bundesrepublik erreicht werden. Bis 2050 ist ein Anteil von mindestens 80 % am Bruttostromverbrauch geplant [2].

1.1 Energie aus Biomasse

Im Sinne der erneuerbaren Energien bezeichnet der Begriff „Biomasse“ organische Stoffe einer pflanzlichen oder tierischen Herkunft, die zur energetischen Verwertung herangezogen werden. Genauer geregelt ist dies innerhalb der Biomasseverordnung (BiomasseV § 2) [3], wonach u.a. die folgenden Stoffe als Biomasse gelten:

- Pflanzen und Pflanzenbestandteile,
- aus selbigen erzeugte Energieträger, deren Bestandteile und Zwischenprodukte aus Biomasse generiert wurden,
- pflanzliche sowie tierische Abfälle und Nebenprodukte aus Land-, Forst- und Fischwirtschaft,
- Bioabfälle (gemäß Bioabfallverordnung),
- durch anaerobe Vergärung erzeugtes Biogas,
- anhand von Biomassevergasung und -pyrolyse gewonnenes Gas und dessen Folgeprodukte sowie
- aus Biomasse produzierte Alkohole.

Biomasse ist energetisch vielfältig nutzbar, da durch unterschiedliche Konversionsstrategien ein breites Spektrum von Energieträgern gewonnen werden kann. Neben biogenen Festbrennstoffen (z. B. Holzhackschnitzel, Pellets und Scheitholz) ermöglicht Biomasse die Bereitstellung von gasförmigen Energieträgern (z. B. Biogas) oder flüssigen Kraftstoffen (z. B. Bioethanol). Bioenergie ist somit in verschiedenen Teilbereichen der Energieversorgung nutzbar. Gegenüber anderen erneuerbaren Energien, wie Windkraft oder Solarenergie, unterliegt sie zudem weniger starken Fluktuationen aufgrund temporärer Wettereinflüsse. Pflanzenartige Biomasse ist zudem CO₂-neutral und bietet im Vergleich zu fossilen Brennstoffen erhebliches Potential zur Einsparung von Treibhausgasen.

Im Jahr 2017 betrug der Anteil erneuerbarer Energien an der Bruttostromerzeugung der Bundesrepublik Deutschland etwa 33,3%, wobei etwa 23,6 % des erneuerbaren Stroms auf Bioenergie entfielen [4]. Der Großteil des durch Biomasse erzeugten Stroms geht auf Biogas und feste Bioenergieträger zurück. Dies wird aus Abbildung 1.1 ersichtlich.

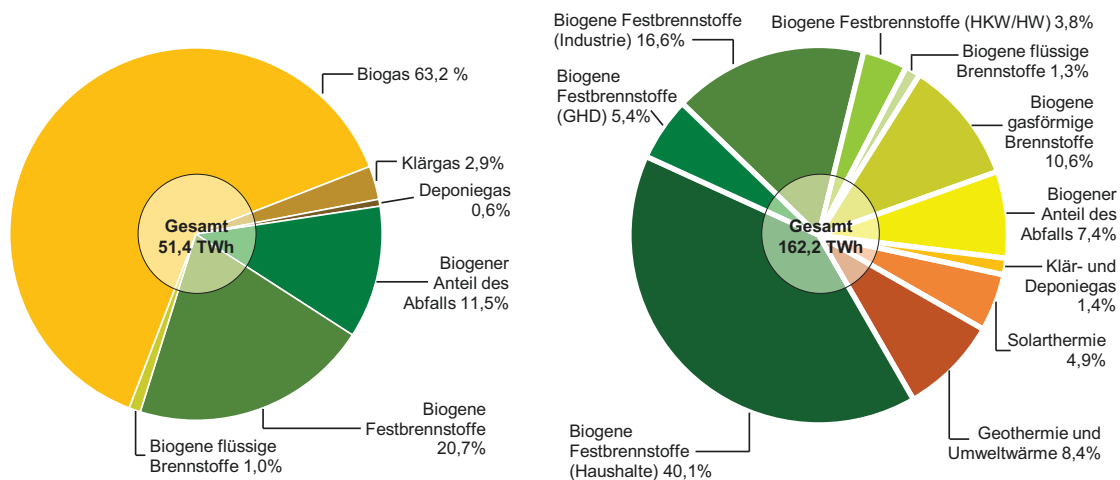


Abb. 1.1: Stromerzeugung aus Biomasse (links) und Wärmebereitstellung aus allen erneuerbaren Energien (rechts) 2017 in Deutschland [4] S. 5 f.

In Abbildung 1.1 ebenfalls dargestellt, ist die mit Hilfe erneuerbarer Energien im Jahr 2017 bereitgestellte Wärme. Es ist zu erkennen, dass der Großteil der Wärme-produktion durch Biomasse bestritten wurde. Die Erzeugung von Wärme in häuslichen und industriellen Anwendungen, Gewerbe, Handel und Dienstleistung (GHD) sowie Heizkraftwerken basiert dabei primär auf dem Einsatz fester Bioenergieträger.

Für zukünftige Szenarien ist davon auszugehen, dass die Verbrennung fester Biobrennstoffe ihre zentrale Rolle für die Wärmeerzeugung aus Erneuerbaren behält.

1.2 Motivation und Zielsetzung dieser Arbeit

Die Verbrennung fester Bioenergieträger ist ein komplexer Vorgang, der sich aus dem Zusammenspiel zahlreicher physikalischer und chemischer Prozesse ergibt. Wärme- und Stofftransport sowie homogene und heterogene chemische Prozesse sind hierbei von zentraler Bedeutung. Trotz intensiver Forschungstätigkeit sind die gesamtheitlichen Abläufe bei der Biomasseverbrennung heute noch nicht verstanden. Vor allem die großtechnische bzw. industrielle Energieerzeugung durch Verbrennung eines biogenen Festbrennstoffs ist häufig von unbeherrschten Phänomenen begleitet, welche Kraftwerksbetreiber vor Herausforderungen stellen. Allen voran ist die Entstehung von Belägen an Feuerraumwänden und Heizflächen ein zentrales Problem in Rostfeuerungsanlagen, welches in vielen Fällen als Hauptursache unplanmäßiger Anlagenstillstände gilt. Es ist bekannt, dass Ablagerungsbildung ein Produkt überlagerter Effekte darstellt, wobei die Anhaftung aus dem Brennstoffbett emittierter Partikel als eine wesentliche Ursache gilt.

In den vergangenen Dekaden nutzen bereits verschiedene Forschergruppen numerische Methoden zur Analyse der Depositionsbildung in Rostfeuerungen. Die Anzahl der in diesem Zusammenhang publizierten Arbeiten ist allerdings überschaubar. Numerische Simulation wurde primär zur Erlangung eines besseren Verständnisses über die komplexen Mechanismen der Ablagerungsentstehung eingesetzt, als zur Optimierung betroffenen Anlagen. Mehrheitlich kamen dabei vereinfachte Festbettmodelle zum Einsatz, um die Prozesse innerhalb der Schüttung zu behandeln und Randbedingungen für die CFD-Simulation des Freeboards und der Belagsbildung zu generieren. Solche phänomenologischen oder teils empirischen Festbettmodelle basieren zumeist auf einer ein- oder zweidimensionalen Auflösung schüttungsinterner Vorgänge und sind nur eingeschränkt in der Lage, die typische Heterogenität fester Bioenergieträger abzubilden. Hierin ist jedoch eine wesentliche Ursache gravierender Belagsbildung zu sehen. Außerdem werden für die Behandlung der ablagerungsrelevanten Partikelfracht teils erheblich vereinfachte Prinzipien innerhalb der CFD-Simulation zugrunde gelegt. Das Material wird überwiegend als abreagierte Asche mit festgelegter Größenverteilung verstanden. Die Emission teilkonvertierter Brenn-

stoffkomponenten, von der insbesondere bei Energieträgern mit hohem Feinanteil auszugehen ist, bleibt zumeist unberücksichtigt. Des Weiteren ist anzumerken, dass in nahezu allen betreffenden Arbeiten ein umfassender Vergleich zwischen dem errechneten Belagsbild und der in einem Realsystem beobachteten Ablagerungsstruktur ausbleibt.

Die Zielsetzung der vorliegenden Arbeit besteht in der Entwicklung einer neuartigen Simulationsmethodik, basierend aus CFD sowie der Diskrete Elemente Methode (DEM), die sowohl eine hochdetaillierte Darstellung der Festbettprozesse als auch der Verbrennung im Freeboard industrieller Biomasserostfeuerungen erlaubt. Im Kontrast zu den etablierten Festbettmodellen soll ein solches CFD-DEM-Verfahren erstmalig genutzt werden, um die Emission von Feinstpartikeln aus dem Brennstoffbett und deren Einfluss auf den Belagsaufbau an den Heizflächen näher zu analysieren. Die Arbeit kann dabei grundsätzlich in die folgenden Teilzielstellungen strukturiert werden:

- Entwicklung eines vollständig gekoppelten CFD-DEM-Verfahrens für die Festbettverbrennung biogener Festbrennstoffe,
- Validierung des Konzeptes sowohl am einzelnen Partikel als auch unter Festbettbedingungen,
- Erweiterung des Verfahrens um ein adäquates Ablagerungsmodell zur Beschreibung des Depositionsaufbaus durch Partikelanhaftung,
- Anwendung des Gesamtmodells auf eine reale industrielle Rostfeuerung zur Analyse der emittierten Partikelfracht und der Belagsentstehung,
- Vergleich zwischen errechnetem und beobachtetem Belagsbild und Ableitung erster Optimierungsansätze.

Die zentrale Herausforderung der vorliegenden Arbeit besteht in der Entwicklung des gekoppelten CFD-DEM-Verfahrens, welches einerseits eine Anwendbarkeit auf große Partikelanhäufungen besitzen muss und andererseits eine hinreichende Genauigkeit hinsichtlich der Verbrennung einzelner Biomasseteilchen erreicht. Da bislang keine etablierten Standardlösungen zur Modellierung der thermochemischen Konversion von Biomassepartikeln existieren, muss hierfür ein eigenes Partikelmodell entwickelt werden. Als Kompromiss zwischen Berechnungsaufwand und Genauigkeit ist in der vorliegenden Arbeit die Entwicklung eines reduzierten 1D-Abbrandmodells angedacht, welches die Verbrennung thermisch dicker Biomasseteilchen darstellen kann.

2 Grundlagen zur Verbrennung fester Bioenergieträger

Wie bereits eingangs erwähnt wurde, sind Bioenergieträger heute in unterschiedlichen Bereichen der Energieerzeugung vertreten. Sie dienen der Stromproduktion, Wärmebereitstellung sowie der Herstellung von Kraftstoffen für mobile Anwendungen. Grundlage gängiger Konzepte zur energetischen Biomasseverwertung ist die Verbrennung, wobei Bioenergieträger entweder als Festbrennstoff direkt verfeuert werden können oder mit Hilfe von Konversionsverfahren zunächst in andere Energieträger überführt werden müssen. Biochemische Umwandlungsmethoden (z. B. anaerobe und alkoholische Gärung) basieren auf einer mikrobiellen Zersetzung der Biomasse und dienen der Herstellung von Biogas und Bioethanol. Physikochemische Verfahren, wie Extraktion/Pressung und anschließende Umesterung, können zur Produktion von Pflanzenölmethylester (PME), einem Substitut von Dieselmotorkraftstoff, eingesetzt werden [5]. Des Weiteren ermöglichen thermochemische Konversionskonzepte, zu denen Pyrolyse, Vergasung und direkte Verflüssigung zählen [6], die Produktion eines breiten Brennstoffportfolios, darunter Holzkohle, Pyrolyseöl und Synthesegas. Die einfachste Methode zur industriellen Strom- und Wärmeerzeugung durch Biomasse besteht jedoch in der direkten Verbrennung bzw. direkten thermochemischen Konversion eines festen Bioenergieträgers, wie Holzhackgut.

2.1 Zusammensetzung holzartiger Brennstoffe

Holzartige bzw. lignocellulotische Biomassen sind Kompositmaterialien, die aus organischen Makromolekülen sowie diversen niedermolekularen Verbindungen, sowohl anorganischer als auch organischer Natur, zusammengesetzt sind. Einen Überblick über die Bestandteile derartigen Biomassen gibt das Schema in Abbildung 2.1. Die Grundlage des Holzes bilden mit Cellulose, Polyosen (Hemicellulose) und Lignin verschiedene Biopolymere. Die aus C, H und O zusammengesetzten Makromoleküle sind zentraler Bestandteil der Zellwände und bestimmen etwa 95 Ma.-% der Trockensubstanz einer Energiepflanze [7]. Die Komposition der Biopolymere variiert

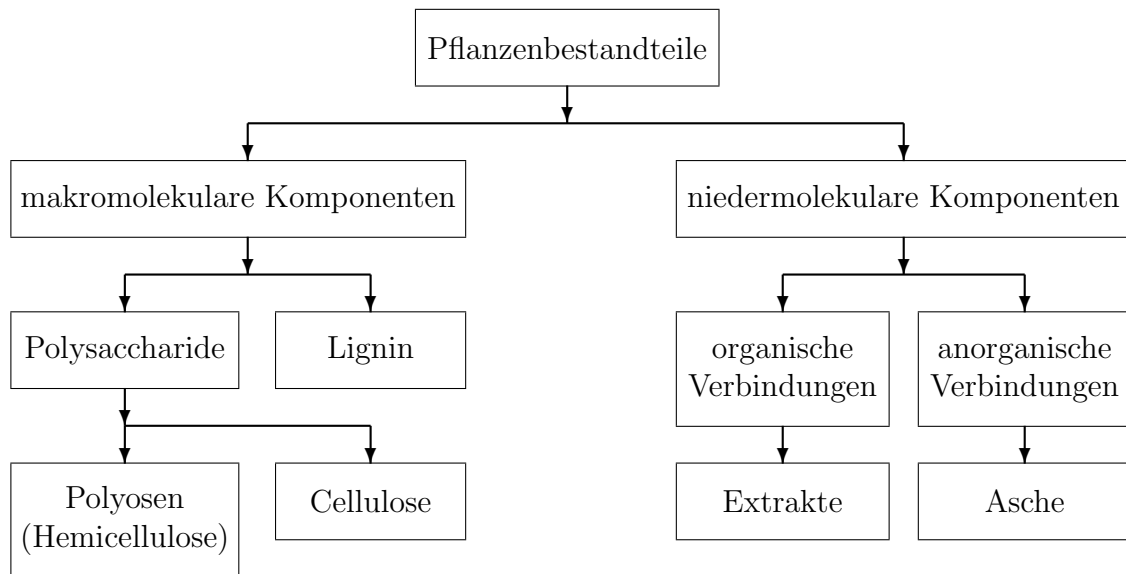


Abb. 2.1: Zusammensetzung von Holz nach [9] S. 2784

in Abhängigkeit der Holzart und unterscheidet sich zudem bei Betrachtung unterschiedlicher Pflanzenbestandteile (Stamm, Zweige, Rinde, etc.). Für verbreitete Holzsorten wie Birke, Buche, Eiche, Fichte oder Kiefer bestreitet der Celluloseanteil des Stamms zwischen 43,6 Ma.-% und 58,4 Ma.-% der Trockensubstanz. Der Anteil von Polyosen und Lignin beträgt hingegen 23,5-32,8 Ma.-% bzw. 10,2-28,4 Ma.-% [8]. Zusätzlich zu den Biopolymeren kann lignocellulotische Biomasse auch Harze, Fette und Öle sowie Proteine enthalten. In den meisten Fällen ist der Anteil solcher Extrakte jedoch vergleichsweise gering.

Neben Cellulose, Hemicellulose und Lignin gehört Wasser zu den Verbindungen innerhalb des Holzes, die in erhöhter Konzentration vorliegen. Dabei kann das Wasser grundsätzlich in drei Formen existieren [10], als:

- **Gebundenes Wasser:** Aufgrund von Wasserstoffbrückenbindungen innerhalb der Zellwänden gebunden,
- **Freies Wasser:** Durch Kapillarkräfte in den Zell-Lumina gehalten,
- **Wasserdampf:** In den Hohlräumen enthaltener Dampf, im thermodynamischen Gleichgewicht mit dem vorhandenen freien Wasser.

Unterhalb des Fasersättigungspunktes, der typischerweise bei einer Holzfeuchte von etwa 30 % angesiedelt ist [10, 11], existiert Wasser lediglich in gebundener Form.

Bei einer Überschreitung der Zellsättigung befindet sich zusätzlich freies Wasser in den Hohlräumen des Holzes. Mit Letzterem im Gleichgewicht ist außerdem eine gewisse Menge Wasserdampf vorhanden. Das innerhalb eines festen Bioenergieträgers enthaltene Wasser ist maßgebend für dessen Heizwert.

In Erweiterung der bisher aufgeführten Verbindungen beinhaltet das Pflanzenmaterial verschiedene Makro- und Mikronährstoffe. In vergleichsweise großer Konzentration sind die Hauptnährstoffe N, K, P, Ca, Mg und S sowie das Element Cl enthalten. Als Spurenelemente können außerdem gewisse Mengen an Si, Na, Fe, Mn, Zn, Cu, Mo, Co, Pb, Al, Cr, Cd, Ni, Hg und As vorhanden sein [7].

Einige der aufgeführten Nährstoffe sowie deren Begleitelemente besitzen hinsichtlich großtechnischer Verbrennungsprozesse hohe Relevanz. Sie sind zentrale Bestandteile gebildeter Ascheverbindungen und gelten als Ursache aschebezogener Problemstellungen. Hinsichtlich der Verbrennung von Biomasse sind laut Lindberg et al. [12] die Elemente K, Na, Ca, Mg, Fe, Al, Si, P, S sowie Cl als dominierende Aschebildner zu sehen. Obernberger [13] misst außerdem den Schwermetallen Zn und Pb eine gewisse Bedeutung bei.

Bei holzartiger Biomasse kann der Anteil der Asche von 0,1-16,5 Ma.-% der Trockensubstanz variieren [14]. Diese Streuung steht einerseits in Verbindung zur Nährstoffaufnahme der Pflanze, ist jedoch primär durch äußere Einflüsse begründet. Diesbezüglich ist vor allem ein erhöhter Eintrag von Mineralien aufgrund der Mitverbrennung von Rinde oder der Verschmutzung des Brennstoffs aufzuführen. Bezüglich des Ursprungs der Brennstoffasche kann in Anlehnung an Baxter [15] und Zevenhoven et al. [16] daher wie folgt differenziert werden:

- in der Brennstoffmatrix gebundene oder in Flüssigkeiten gelöste anorganische Bestandteile (Nährstoffe),
- im Brennstoff befindliche mineralische Einschlüsse,
- aufgrund von Abbau-, Transport- und Aufbereitungsprozessen eingetragene Mineralien.

2.2 Thermochemische Konversion

Ein der Verbrennung zugeführtes Brennstoffteilchen durchläuft verschiedene Phasen der stofflichen und energetischen Umwandlung, die allgemein als thermochemische Konversion bezeichnet werden. Eine Aufheizphase, bedingt durch externe Wärmezufuhr, initiiert zunächst den Trocknungsprozess. Hierbei entweichen unter Wärmeeinwirkung das freie sowie gebundene Wasser aus dem Holzteilchen. Anschließend leitet eine weitere Aufheizphase die Pyrolyse ein. Bei diesem Vorgang kommt es zur thermischen Zersetzung der Biomassepolymere unter Freisetzung von Pyrolysegasen und -ölen sowie unter Bildung eines festen Rückstands, dem Restkoks. Bei höheren Temperaturen erfolgen Vergasung und Verbrennung des Kokes durch heterogene chemische Reaktionen auf der Restkoksfläche. Bei einer vollständigen Umsetzung des Materials bleiben lediglich anorganische Verbindungen in Form von Asche zurück. Überlagert mit den aufgeführten Umwandlungsprozessen am Brennstoffteilchen finden in der umliegenden Gasphase verschiedene chemische Prozesse statt. Dabei handelt es sich zum einen um die thermische Zersetzung der Pyrolyseöle sowie zum anderen um die Oxidation brennbarer Gasspezies.

2.2.1 Trocknung

Die Trocknung des Brennstoffs ist ein endothermer Prozess, bei dem äußere Wärmeeinwirkung zur Entweichung des freien und gebundenen Wassers führt. Da zur Freisetzung des gebundenen Wassers zusätzlich die Bindungsenergie überwunden werden muss, ist davon auszugehen, dass bei geringeren Temperaturen zunächst das freie Wasser entweicht [17].

Innerhalb eines frischen Brennstoffteilchens sind das freie Wasser und Wasserdampf im thermodynamischen Gleichgewicht, wobei sich bei der vorhandenen Temperatur ein definierter Sättigungsdampfdruck einstellt. Die Aufheizung des Teilchens führt zu einem Anstieg des Sättigungsdampfdrucks, was in einer erhöhten Dampfkonzentration innerhalb des Partikels resultiert. Das Konzentrationsgefälle zwischen dem Partikel und der umliegenden Gasphase forciert anschließend eine Bewegung des Dampfes in Richtung der freien Strömung. Die aufgrund des Dampftransportes bedingte Konzentrationsminderung innerhalb des Partikels wird durch weitere Verdampfung des freien Wassers ausgeglichen. Ist das freie Wasser verbraucht, folgt bei

höheren Temperaturen die Loslösung und nachfolgende Verdampfung des gebundenen Wassers. Der Trocknungsvorgang hält an bis das gesamte Wasser verbraucht ist. Dabei können Prozesstemperaturen von bis zu 200 °C erreicht werden [7].

2.2.2 Pyrolyse

Im Anschluss an die Trocknung folgt die pyrolytische Zersetzung der Biomassepolymere. Als Pyrolyse wird die irreversible Zerstörung der Makromoleküle unter Wärmeeinwirkung und ohne Zugabe eines externen Oxidationsmittels bezeichnet.

Mit dem Abbau von Hemicellulose, Cellulose und Lignin geht die Freisetzung verschiedener Pyrolysegase und -öle einher. Der Begriff Pyrolysegase bezeichnet ein Gemisch gasförmiger Verbindungen, welches vorrangig aus CO, CO₂, CH₄, H₂ und einigen C₂-Kohlenwasserstoffen zusammengesetzt ist [18]. Das Pyrolyseöl ist typischerweise eine Mixtur aus Wasser (30 %), Phenolen (30%), Aldehyden und Ketonen (20 %) sowie Alkoholen (10%) und anderen Verbindungen (10 %) [19]. Es handelt sich um Komponenten, die unter den vorherrschenden Prozesstemperaturen dampfförmig vorliegen. Die aus Gasen und Ölen zusammengesetzten volatilen Bestandteile können bei lignocellulotischer Biomasse bis zu 86 Ma.-% des Trockenmaterials bestreiten [14]. Die Zersetzung führt daher zu einer signifikanten Massenabnahme und ist der dominierende Prozess in der thermochemischen Umwandlungskette biogener Festbrennstoffe. Neben der Reduktion in der Partikelmasse erfährt das Holzteilchen signifikante strukturelle Änderungen im Zuge der Zersetzungsprozesse. Das entweichende Gemisch aus Teeren und Gasen hinterlässt einen hochporösen und kohlenstoffreichen Restkoks, dessen Anteil sich in Abhängigkeit des Holzes auf 12,3-26,3 Ma.-% der Trockensubstanz beläuft [14].

Die thermische Zersetzung des Holzes beginnt üblicherweise mit dem Zerfall der Hemicellulose ab Temperaturen von etwa 200 °C, siehe Abbildung 2.2. Der Zerfall der Polyosen erreicht bei Temperaturen von 320-350 °C seinen Höhepunkt [7], was bezüglich des Gesamtumsatzes mit der Schulter der Gesamtumsatzrate assoziiert wird. Die Zersetzung erfolgt maßgeblich unter Bildung volatiler Zwischenprodukte mit einer hohen Ausbeute an Pyrolysegasen [20]. Bei höheren Temperaturen gewinnt die Zerstörung der Cellulose zunehmend an Bedeutung und findet zwischen 350 °C und 400 °C ihr Maximum. In Verbindung mit dem Cellulosezerfall kann in diesem Temperaturbereich insgesamt die höchste Umsatzrate des Holzes verzeichnet wer-

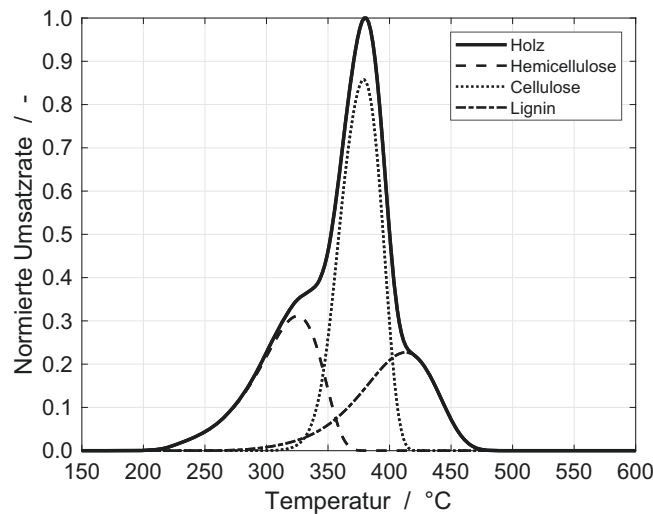
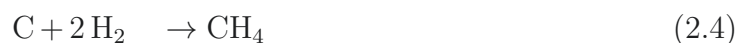


Abb. 2.2: Typische Pyrolyserate von Holz und dessen Makroverbindungen

den. Ähnlich wie im Fall der Hemicellulose resultiert die Zersetzung der Cellulose primär in der Produktion flüchtiger Bestandteile, wobei jedoch vorrangig Pyrolyseöle anfallen [21]. Die Umwandlung des Lignins findet in einem weiten Temperaturbereich statt und ist gekennzeichnet durch Umsatzraten von vergleichsweise geringer Intensität. Der Ligninzerfall hat insgesamt die höchste Produktion an Restkoks zur Folge [20] und erreicht bei Temperaturen um 400 °C sein Maximum. Bei Temperaturen oberhalb von 550 °C ist die pyrolytische Zersetzung von Holz typischerweise abgeschlossen und es verbleibt lediglich der Restkoks.

2.2.3 Heterogene Koksreaktionen

Der pyrolytischen Zersetzung folgend, beginnt bei höheren Temperaturen der Abbau des Restkokes durch chemische Prozesse auf der Oberfläche des porösen Materials. Dies geschieht hauptsächlich durch die Reaktion mit O_2 (Verbrennung), wobei in Abwesenheit von Sauerstoff auch Vergasungsreaktionen mit CO_2 , H_2O und H_2 bedeutsam werden können [18].



Typischerweise verläuft die Verbrennungsreaktion (Gl. 2.1) um einige Größenordnungen schneller als der dominierende Vergasungsprozess [17]. Für die Vergasung von Biomassekoks ist zudem bekannt, dass die Reaktion mit Wasserdampf (Gl. 2.3) bis zu fünf mal schneller abläuft als die in Gl. 2.2 dargestellte Boudouardreaktion [22]. Im Vergleich zur Verbrennung und den bereits aufgeführten Vergasungsreaktionen ist die Reaktion 2.4 für technische Applikationen oft weniger bedeutsam [18].

Da die Edukte der Reaktionen 2.1 bis 2.4 in unterschiedlichen Phasen vorliegen, handelt es sich um heterogene chemische Prozesse. Neben der chemischen Reaktion auf der Koksoberfläche beinhalten derartige Vorgänge verschiedene Stofftransportphänomene, wie die Grafik in Abbildung 2.3 zeigt.

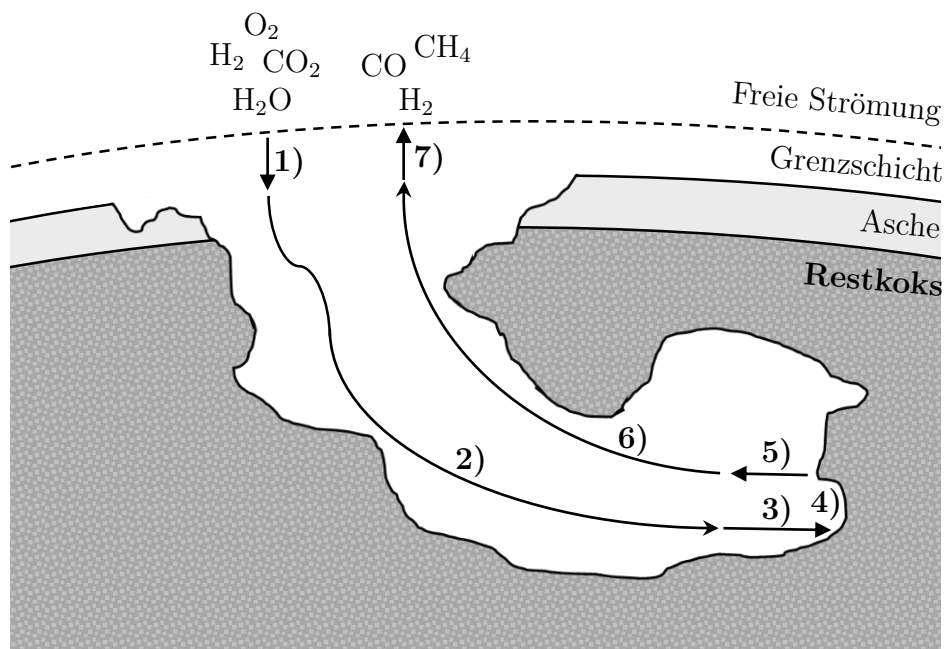


Abb. 2.3: Teilvorgänge heterogener Restkoksreaktionen; die aufgeführten Zahlen korrespondieren mit den folgenden Prozessen: 1) Filmdiffusion der gasförmigen Reaktanden, 2) Porendiffusion, 3) Adsorption, 4) Oberflächenreaktion, 5) Desorption der gebildeten Produkte, 6) Porendiffusion und 7) Filmdiffusion

Innerhalb der freien Strömung erfolgt der Transport der gasförmigen Reaktanden vorwiegend durch Konvektion. Filmdiffusion (1) durch die das Partikel umliegende Grenzschicht erzwingt einen Transport der Gasspezies zur äußeren Partikeloberfläche. Aufgrund von Porendiffusion (2) kommt es zu einer Bewegung der Moleküle

durch das Porensystem des Koksteilchens bzw. durch die den Restkoks umgebende Asche. Im Anschluss erfolgt die Adsorption der Reaktanden (3) und es finden die chemischen Reaktionen (4) auf der Koksoberfläche statt. Die aus den Gleichungen 2.1 bis 2.4 hervorgehenden Reaktionsprodukte desorbieren (5) und begeben sich durch Poren- und Filmdiffusion (6,7) in die freie Strömung. Hier unterliegen sie einem konvektionsbedingten Abtransport.

Die makroskopische Reaktionsrate der Koksumwandlung steht sowohl in Verbindung zu den aufgeführten Transportprozessen als auch zur Mikrokinetik der Oberflächenreaktionen. Begrenzt durch den langsamsten Teilprozess kann der Koksabbau entweder kinetisch kontrolliert oder stofftransportlimitiert erfolgen [23, 24]. Aus diesem Sachverhalt resultiert die Ausprägung unterschiedlicher Verbrennungsregime, wobei der Gesamtprozess nach Di Blasi [18]

- kinetisch kontrolliert (Regime 1),
- diffusionslimitiert (Regime 2) oder
- aufgrund des äußeren Stofftransportes begrenzt (Regime 3)

sein kann. Bei kleinen Kokspartikeln und insgesamt niedrigen Prozesstemperaturen unterliegt der Koksabbau einer Begrenzung durch die Mikrokinetik der Oberflächenreaktion [25]. Aufgrund der geringen Temperaturen verläuft die chemische Umwandlung träge, wenngleich externer Stofftransport und intrapartikuläre Diffusion für eine ausreichende Konzentration an Reaktionspartnern sorgen. Dieses erste Verbrennungsregime ist durch einen Thiele-Modul

$$\phi = r_p \sqrt{\frac{\dot{r}_{\text{Kin}}}{D_{\text{eff}}}} \quad (2.5)$$

mit Werten kleiner eins gekennzeichnet. Die vergleichsweise schnelle Diffusion sorgt für ein gleichmäßiges Eindringen der Reaktanden und einen einheitlichen Koksabbau innerhalb des Teilchens. Bedingt durch den gleichmäßigen Umwandlungsprozess resultiert eine Dichtereduktion bei nahezu gleichbleibender Partikelgröße [18]. Bei zunehmender Partikelgröße gewinnt Porendiffusion aufgrund der längeren Diffusionswege an Bedeutung und kann im Zusammenspiel mit den chemischen Prozessen die Koksumwandlung limitieren. Bei einem Thiele-Modul signifikant größer als eins ist der Gesamtprozess diffusionskontrolliert. Innerhalb des zweiten Regimes

sorgt schleppende Porendiffusion für ein begrenztes Eindringen der Reaktanden in den Restkoks, sodass der Abbauvorgang maßgeblich an der äußeren Oberfläche des Kokes stattfindet [23]. Es resultiert eine Schrumpfung des Teilchens bei konstanter Dichte, wobei die Umwandlungsrate in direkter Abhängigkeit zur äußeren Oberfläche steht. Ein ähnliches Verhalten ist für das dritte Verbrennungsregime zu beobachten. Hierbei kontrolliert jedoch der Transport der Reaktanden aus der umliegenden Gasphase den Abbau des Restkokes.

Die Umwandlungsrate des Biomassekokes weist signifikante Abhängigkeit zur Konzentration der gasförmigen Reaktanden, der Partikelgröße sowie den Prozesstemperaturen auf. Überdies beeinflussen strukturelle Gegebenheiten die Reaktivität des Materials. Biomassekoks besitzt im Vergleich zu Kohlekoks eine deutlich höhere Reaktivität, was vor allem auf eine gesteigerte Porosität und größere Oberfläche zurückzuführen ist. Die Reaktivität des Restkokes steht außerdem in Verbindung zur Pyrolyseheizrate sowie dem Vorkommen katalytisch agierender Elemente (Na, K, Ca) [22, 26]. Eine weitere Besonderheit von Biomassekoks besteht darin, dass seine Reaktivität im Laufe des Umwandlungsprozesses weiter zunimmt [27]. Dies ist primär durch das signifikante Wachstum der reaktiven Oberfläche zu begründen.

Bei einem vollständigen Ausbrand des Restkokes bleiben lediglich anorganische Brennstoffbestandteile in Form von Asche zurück. Die Umwandlung des anorganischen Materials basiert auf einer Vielzahl physikochemischer Vorgänge, die sich aufgrund der vorkommenden Mineralien und Phasenzustände deutlich von den Umwandlungsprozessen der Biomasse und des Restkokes differenzieren lassen. Laut Vassilev et al. [28] können Biomasseaschen aus etwa 290 verschiedenen Phasen und Mineralien bestehen. Den Großteil der Asche bilden kristalline sowie amorphe anorganische Bestandteile. Ebenso können Koks und organische Mineralien sowie gasförmige und flüssige Einschlüsse organischer und anorganischer Komponenten enthalten sein. Eine umfassende Darstellung bekannter Transformationsprozesse von Biomasseaschen ist nicht Bestandteil dieser Arbeit. Für weitergehende Informationen sei daher auf die Arbeiten von Vassilev et al. [28] oder Niu et al. [29] verwiesen.

2.3 Feuerungskonzepte

Hinsichtlich der großtechnischen Verbrennung fester Brennstoffe sind drei grundlegende Feuerungskonzepte zu unterscheiden: Festbett-, Wirbelschicht- und Staubfeuerung. Bei Festbettfeuerungen (FBF) wird einem Brennstoffbett Verbrennungsluft mit geringen Strömungsgeschwindigkeiten zugeführt, sodass ein Transport des Energieträgers aufgrund der Fluidbewegung weitestgehend ausbleibt. Typische Vertreter dieser Kategorie sind die in Abbildung 2.4 veranschaulichte Rost- und Unterschubfeuerung.

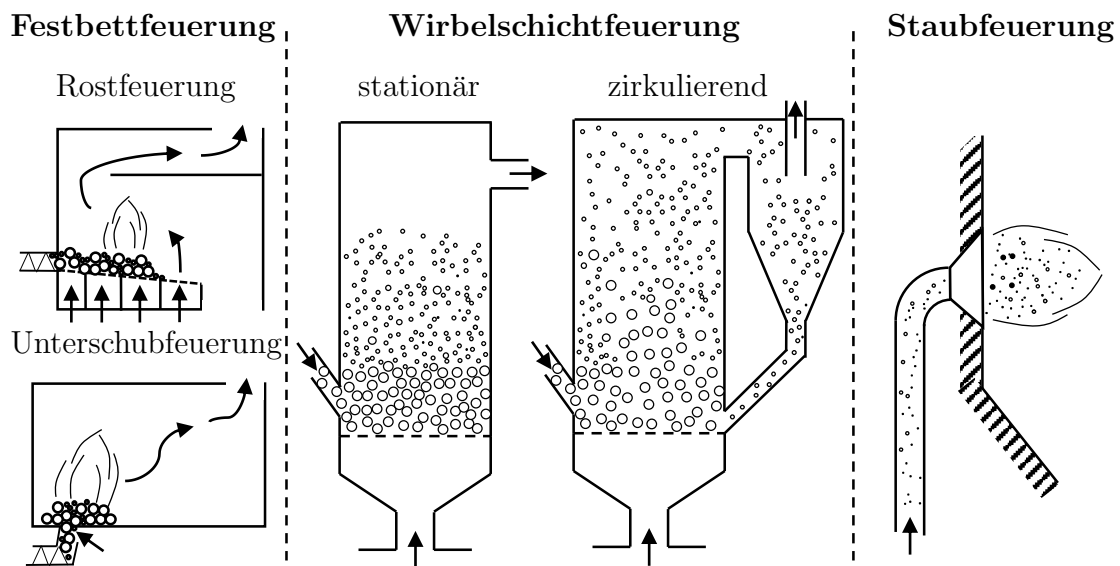


Abb. 2.4: Schematische Darstellung unterschiedlicher Feuerungssysteme, angelehnt an [7] S. 493

Bei höheren Strömungsgeschwindigkeiten folgt ab einem Schwellenwert, dem Fluidisierungspunkt, eine Auflockerung und Expansion des Bettmaterials. Die einzelnen Teilchen des Brennstoffs werden aufgrund der Luftbewegung in Schwebelage gehalten oder transportiert. Dieses Verhalten bietet die Grundlage für Wirbelschichtfeuerungen. Häufig enthält das Wirbelbett betreffender Anlagen neben dem Brennstoff ein zusätzliches Inertmaterial (z. B. Quarzsand) zur Intensivierung von Mischungsprozessen und dem Ausgleich von Temperaturspitzen. Sogenannte stationäre Wirbelschichtfeuerungen (SWSF) sind durch eine konstante Ausdehnung des Bettes gekennzeichnet. Materialaustrag wird weitgehend vermieden. Zirkulierende Wirbelschichtfeuerungen (ZWSF) basieren hingegen auf höheren Gasgeschwindigkei-

ten und einem partiellen Austrag leichter Partikel. Eine Vorrichtung gewährleistet die Abscheidung und nachfolgende Rückführung der ausgeschiedenen Bestandteile. Im Fall von Flugstrom- bzw. Staubfeuerungen (SF) wird feingemahlener Brennstoff aufgrund hoher Gasgeschwindigkeiten pneumatisch transportiert. Der Ausbrand der Brennstoffteilchen erfolgt im Flug, wie in Abbildung 2.4 dargestellt. Festbett-, Wirbelschicht- und Staubfeuerungen werden in sehr unterschiedlichen Leistungsbereichen eingesetzt, wie aus Tabelle 2.1 hervorgeht.

Tab. 2.1: Ausgewählte Merkmale unterschiedlicher Feuerungsarten [30]

	Einheit	FBF	SWSF	ZWSF	SF
Feuerungsleistung	MW _{th}	<100	<100	<800	<2000
Brennkammertemperatur	°C	1200-1400	800-900	850-950	1200-1400
Gasgeschwindigkeit	[m s ⁻¹]	<2	1,5-2,5	4-7	5
Partikelgröße (Kohle)	[mm]	<40	<10	≈ 5	≤ 0,1

Staubfeuerungen spielen für die Verbrennung stückiger Bioenergieträger keine Rolle und sind lediglich in Verbindung mit feingemahlenden Brennstoffen ($D_p < 2$ mm [5]), wie Sägemehl, anzutreffen. Während für die Verbrennung von Holzhackgut bei Leistung von mehr als 15 MW auch Wirbelschichtanlagen eingesetzt werden, so dominieren bei geringeren Anlagenleistungen Unterschub- und Rostfeuerungen [7]. Festbettfeuerungen mit Vorschubrost werden für die Verbrennung von Holzhackgut bis zu einer Leistung von 60 MW appliziert. Sie können mit unterschiedlichen Holzbrennstoffen beschickt werden und ermöglichen die Nutzung von Energieträgern mit bis zu 50 Ma.-% Asche und 60 Ma.-% Wasser [7]. Bezüglich des Brennstoffs bieten Vorschubrostfeuerungen demnach ein Höchstmaß an Flexibilität. Durch die Verwendung stark aschehaltiger und fluktuierender Energieträger ergeben sich jedoch verschiedene Problemstellungen. Insbesondere die Entstehung von Ablagerungen ist ein Kernproblem mit signifikanten Auswirkungen auf den Kraftwerksbetrieb.

3 Ablagerungsentstehung in Biomasseverbrennungsanlagen

Während der Verbrennung fester Energieträger kommt es an den Brennkammerwänden und Heizflächen thermischer Kraftwerke häufig zur Ansiedlung von Verbrennungsrückständen. Die daraus resultierenden Ablagerungsstrukturen können nachhaltig das Systemverhalten beeinflussen und langfristig zu einer Reduktion des Anlagenwirkungsgrades führen. Massive Ablagerungsbildung und damit in Verbindung stehende Problemstellungen, wie Bauteilschädigungen, sind eine Hauptursache unplanmäßiger Anlagenstillstände. Die Reinigung der Anlage sowie ablagerungsbedingte Reparaturarbeiten stellen Kraftwerksbetreiber zusätzlich vor hohe Kosten. Belagsbildung ist ein Phänomen, welches brennstoff- sowie anlagenübergreifend auftritt. In Abhängigkeit des Energieträgers, der Systembau- und Betriebsweise können neben der Feuerung sowohl Wärmeübertrager im Hoch- als auch Niedertemperaturbereich von Belägen befallen sein. Die örtliche Ausprägung der Depositionsstrukturen kann jedoch erheblich variieren. Die in Abb. 3.1 dargestellten Aufnahmen aus einer mit Waldrestholz betriebenen Rostfeuerungsanlage verdeutlichen dies.



Abb. 3.1: Ablagerungen in einer Biomasserostfeuerungen nach 6 monatiger Betriebszeit, an den Rauchgasdüsen (links), an einer Feuerraumseitenwand (Mitte) und am Durchtrittsgitter (rechts)

Laut Muhammadieh [31] lassen sich drei Erscheinungsbilder von Ablagerungen differenzieren: Verschlackung, Verschmutzung und Versinterung. Erstere ist durch feste, durchgeschmolzene Depositschichten charakterisiert und resultiert aus hohen Prozesstemperaturen oder der Entstehung niedrigschmelzender Verbrennungsrückstände. Verschmutzungen sind hingegen lose Strukturen, die sich aus der Anhaftung abreagierter Partikel und als Ergebnis von Kondensationsprozessen ergeben. Versinterungen repräsentieren eine Übergangsform zwischen Verschlackungs- und Verschmutzungsphänomenen. Trotz des Ausbleibens eines ersichtlichen Schmelzflusses kommt es bei Versinterungen zu Verwachsung und Verklebung abgelagerter Teilchen [31].

Ablagerungsbildung auf den Heizflächen resultiert in einer verminderten Wärmeübertragung an den Wasser-Dampf-Kreislauf, was langfristig zu einer Abnahme der Anlageneffizienz führt. Wachsende Beläge und die sich daraus ergebende Reduktion der Wärmeauskopplung forcieren eine Erhöhung der Rauchgastemperaturen, woraus oft eine weitere Zunahme der Belagsentstehung resultiert. Wegen dieses Sachverhaltes ist Ablagerungsbildung zumeist ein selbstverstärkender Effekt. Neben der Belagsbildung und der daraus hervorgehenden Wirkungsgradreduktion, sind weitere Problemstellungen infolge gravierender Schlacke- und Verschmutzungsbildung wie folgt bekannt:

- höhere Gasgeschwindigkeiten und erosive Materialbeschädigung durch Versperrung von Strömungsengstellen,
- Beschädigung von Rostelementen oder Aschetrichter aufgrund der Bildung und Ablösung massiver Wechtenstrukturen,
- ablagerungsbedingte Korrosionsschäden an Wärmeübertragerrohren,
- Agglomeration von Partikeln des Bettmaterials in Wirbelschichtanlagen wegen der Entstehung niedrigschmelzender Verbindungen aus SiO_2 und KCl [32],
- Verklebung einzelner Rostelemente beim Abfahrvorgang durch Bildung und Erstarrung von Rostschlacke [32]

Verschlackungs- und Verschmutzungsphänomene sind im Wesentlichen auf aschebildende Brennstoffbestandteile sowie Freisetzung und Transport der Asche in Feuerung und Dampferzeuger zurückzuführen. Da anfallende Asche ein natürliches Nebenprodukt der Verbrennung ist, lassen sich aschebezogene Probleme nicht gänzlich

vermeiden. Dennoch können eine gezielte Anlagenauslegung auf den zu verwendenen Brennstoff sowie eine optimierte Betriebsführung dazu beitragen, Ablagerungsentstehung zu vermindern.

3.1 Freisetzung und Transport von Asche

Wie unter Abschnitt 2.1 erläutert, beinhalten feste Bioenergieträger anorganische Verbindungen, die entweder organisch gebunden, gelöst oder in Form von Einschlüssen vorliegen. Ebenso sind Bioenergieträger aufgrund äußerer Einwirkung häufig mit anorganischen Fremdstoffen kontaminiert. Während der thermochemischen Konversion durchläuft das Material eine Vielzahl chemischer und physikalischer Prozesse unter Bildung vielfältiger Ascheverbindungen.

Der Großteil der in Biomasserostfeuerungen vorkommenden anorganischen Bestandteile verbleibt nach der Verbrennung in Form von Rückstandsasche am Rost. Der Anteil der Rostasche bestreitet in Abhängigkeit von Brennstoff und Anlage etwa 60-90 % [33]. Teilchen der Rückstandsasche können als grobe Aschepartikel charakterisiert werden. Die Bildung derartiger Teilchen ist gekennzeichnet durch Fragmentierung von Kokspartikeln und mineralischen Teilchen, Koaleszenz sowie physikochemischen Transformationen [34]. Die Entstehung der Rückstandsasche geht vor allem auf nicht-flüchtige Verbindungen der Elemente Si, Ca und Mg zurück [13].

Im Zuge der Verbrennung verlässt ein Teil des anorganischen Materials den Rost und wird mit dem Rauchgas in Richtung der Wärmeübertrager befördert. Die aus dem Brennstoffbett an das Rauchgas überführten Partikel enthalten neben leichter Rückstandsasche auch unvollständig umgesetzte Teilchen der Brennstofffeinfraktion, deren Ausbrand erst innerhalb der freien Strömung endet. Während des Verbrennungsprozesses kommt es außerdem zur Freisetzung inhärenter anorganischer Verbindungen, die ebenfalls an das Rauchgas überführt werden. Aus der Freisetzung jener Bestandteile resultieren überwiegend Primärpartikel mit einer Größe von weniger als $0,1\text{ }\mu\text{m}$ [34]. Die Aerosolpartikel sind das Ergebnis von thermischer und chemischer Loslösung, intrapartikulärer Konvektion im Zuge rapider Umwandlungsprozesse sowie Verdampfung flüchtiger Bestandteile [15]. Letzteres betrifft volatile Verbindungen auf der Basis von K, Na, S, Cl, Zn und Pb [13]. Innerhalb des Rauchgases vorliegende Aschedämpfe durchlaufen unter Bildung neuer Aschespezies diverse chemische Prozesse. Dabei entstandene Verbindungen können bei einer Übersättigung

zur Nukleation zusätzlicher Aerosolpartikel führen. Diesbezüglich sind für die Verbrennung von Frischholz vor allem eine hohe Konzentration der Alkali-Metalle Kalium und Natrium sowie Chlor und Schwefel relevant. Die Freisetzung von Alkali-Verbindungen erfolgt hauptsächlich während des Koksabbrands bei Temperaturen oberhalb von 600 °C. Während der Entgasung werden hingegen nur geringe Mengen organisch gebundener Alkalimetalle an das umgebende Rauchgas überführt [35]. Da Kalium zumeist in signifikant höherer Konzentration als Natrium vorliegt, ist die Bildung von Aerosolteilchen vor allem auf Kaliumverbindungen zurückzuführen. Charakteristisch für die Entstehung der Aerosolpartikel ist die Bildung von K_2SO_4 aus der bei hohen Temperaturen vorrangig vorliegenden Verbindung KCl. Thermodynamische Gleichgewichtsberechnungen von Christensen et al. [36] legen dar, dass das gebildete Kaliumsulfat bereits bei 750-820 °C zu homogener Kondensation neigt. Die dabei entstandenen Primärpartikel forcieren anschließend eine heterogene Kondensation verfügbarer Kaliumverbindungen, was neben K_2SO_4 auch KCl und $(KCl)_2$ beinhaltet [36]. Die Aerosolteilchen bestehen deshalb überwiegend aus Kalium, Chlor und Schwefel. Dies konnte ebenfalls durch experimentelle Untersuchungen festgestellt werden [37, 38].

Heterogene Kondensation von Aschedämpfen an Aerosol- und groben Flugaschepartikeln, chemische Reaktionen auf der Partikeloberfläche sowie Koaleszenz und Agglomeration führen zu einer großen Bandbreite unterschiedlicher Partikel innerhalb des Rauchgases einer Biomasseverbrennungsanlage. Aufgrund der Anwesenheit von Aerosolteilchen sowie groben Flugaschepartikeln sind gemessene Partikelgrößenverteilungen meist bimodal [13, 37, 39, 40]. In Abbildung 3.2 ist eine solche Verteilung illustriert. Der Feinpartikelmodus enthält üblicherweise Teilchen mit einem gemessenen aerodynamischen Durchmesser zwischen 0,1 bis 1 µm. Bezüglich grober Aschepartikel werden hingegen Durchmesser bis zu einigen hundert Mikrometern verzeichnet. Die Verteilung weist eine signifikante Abhängigkeit von Anlage und Brennstoff, speziell der Komposition des anorganischen Materials, auf. Des Weiteren steht die gemessene Konzentration der Feinpartikel in direktem Zusammenhang zur Probenentnahmestelle [41]. Eine Erklärung dieses Verhaltens ist in der hohen Temperaturabhängigkeit homogener Kondensation und der damit einhergehenden Produktion der Aerosolteilchen zu sehen.

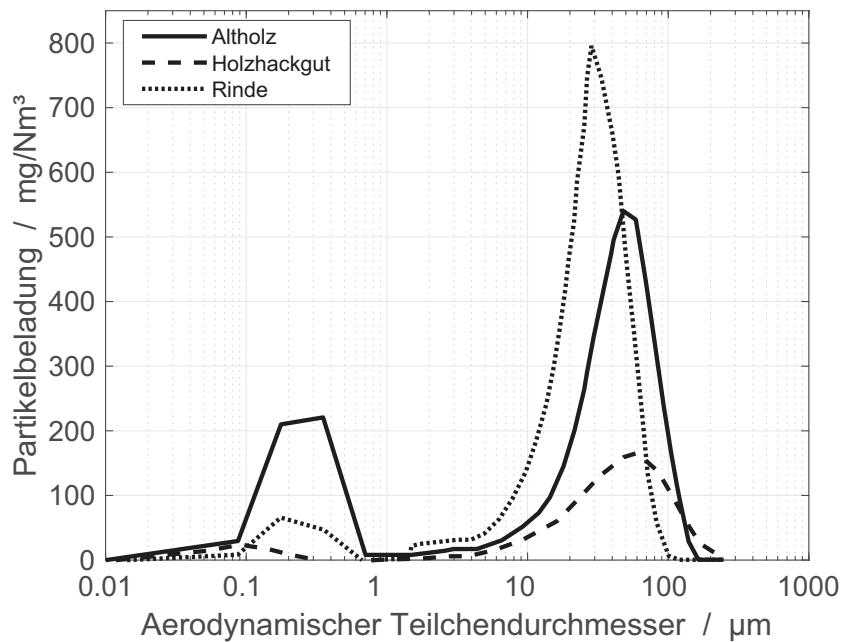


Abb. 3.2: Gemessene Größenverteilung von Flugaschepartikeln nach [13] S. 12

Da nicht sämtliche Aschedämpfe durch die Prozesse der Aerosolbildung verbraucht werden, transportiert das Rauchgas neben der Partikelfracht signifikante Mengen dampfförmiger Ascheverbindungen. In Hinsicht auf die Heizflächenverschmutzung sind sowohl die Konzentration vorhandener Partikel als auch im Rauchgas enthaltener Dämpfe relevant. In diesem Zusammenhang erwirken folgende Mechanismen eine Entstehung bzw. ein Wachstum der Beläge:

- Anhaftung grober Flugasche und Anbackung von Aerosolteilchen,
- Heterogene Kondensation dampfförmiger Ascheverbindungen an den kälteren Heizflächen,
- Heterogene chemische Prozesse zwischen der umliegenden Gasphase und den Belägen bzw. darin enthaltenen Einschlüssen.

3.2 Anhaftung von grober Flugasche und Aerosolteilchen

Die Entstehung von Ablagerungen an Feuerraumwänden und Heizflächen steht häufig in direkter Verbindung zur Partikelfracht, die sich mit Hilfe des Rauchgases bewegt. Innerhalb der Rauchgase ist die Partikelbewegung maßgeblich durch Widerstands- und Gravitationskraft sowie die Trägheit der Ascheteilchen bestimmt. Ebenso können Turbulenz (Wirbeldiffusion) und existierende Temperaturgradienten (Thermophoresse, Thermodiffusion) Einfluss auf die Teilchenbewegung nehmen. Auf dem Weg durch Brennraum und Dampferzeuger gelangt ein Teil der Partikel bis an die Oberfläche angrenzender Wände. In diesem Zusammenhang spielen insbesondere

- Inertial Impaction (Trägheitsbedingter Aufprall),
- Wirbeldiffusion und
- Thermophorese

eine Rolle [42,43]. „Inertial Impaction“ bezeichnet den aufgrund von Partikelträgheit hervorgerufenen Aufprall eines Teilchens auf Wände bzw. Einbauten. Wegen ihrer Trägheit besitzen größere Partikel nur eingeschränktes Vermögen der Strömung zu folgen und werden vor allem bei Strömungsumlenkungen leicht abgeschieden. Aus diesem Grund ist Inertial Impaction bei Partikelgrößen von mehr als 10 μm häufig der dominierende Transportmechanismus in Richtung ablagerungsbelasteter Oberflächen. Weniger träge Ascheteilchen werden außerdem durch Wirbel- sowie Thermodiffusion in Richtung der Oberflächen befördert. Zevenhoven et al. [16] geben an, dass diffusionsbedingte Transportprozesse bis zu einer Partikelgröße von $\leq 10 \mu\text{m}$ von Bedeutung sind. Tomeczek und Waclawiak [44] nennen ebenfalls 10 μm als Grenzwert für die Bedeutsamkeit von Wirbeldiffusion, limitieren die Relevanz von Thermodiffusion allerdings auf Partikel mit einem Durchmesser $\leq 1 \mu\text{m}$. Auch Baxter [15] erklärt, dass Thermophorese für die Ablagerungsbildung durch Submikron-Partikel bedeutsam ist. Weber et al. [43] geben hingegen an, dass sich Thermophorese auch auf Teilchen bis zu einer Größe von 3 μm auswirkt. In Bezug auf die genannten Transportvorgänge ist daher festzuhalten, dass Inertial Impaction die Ablagerungsentstehung durch grobe Aschepartikel bestimmt. Für die Anlagerung kleiner und mit geringer Trägheit versehener Flugaschepartikel kann außerdem Wirbeldiffusion

relevant werden. Thermophorese ist vor allem bei sehr hohen Temperaturgradienten im Bereich der Heizflächen von Bedeutung. Ihre praktische Relevanz beschränkt sich jedoch auf den Feinpartikelmodus.

Ein an die Oberfläche transportiertes Teilchen kann entweder haften und zu Belagsbildung bzw. -wachstum führen, oder reflektieren und gegebenenfalls vorhandenes Material abtragen. Diesbezüglich sind sowohl die Begebenheiten der Partikel-Wand-Kollision als auch die Beschaffenheit von Partikel und Wand- bzw. Ablagerungsoberfläche entscheidend. Innerhalb der Feuerung sowie an den Strahlungsheizflächen ist die Anhaftung der Partikelfracht vorrangig das Ergebnis hoher Rauchgas- und Partikeltemperaturen, die eine Überschreitung des Ascheerweichungspunktes ermöglichen. Der Flamme ausgesetzte Flugaschepartikel und im Ausbrand befindliche Teilchen der Brennstofffeinfraktion verzeichnen teils hohe Partikeltemperaturen, welche ein Aufschmelzen des anorganischen Materials verursachen. Bedingt durch den vorhandenen Schmelzphasenanteil erhöht sich die Haftungsneigung der Ascheilchen signifikant. Im Bereich von Primär- und Sekundärverbrennung vorhandene Ablagerungen beinhalten aufgrund der thermischen Interaktion mit den heißen Rauchgasen ebenfalls geschmolzenes Material. Die an den Wänden entstandenen Schmelzen erhöhen zusätzlich die Haftwahrscheinlichkeit aufkommender Aschepartikel. Gravierende Verschlackung ist daher vorrangig das Ergebnis hoher Prozess-temperaturen und/oder niedrig schmelzender Ascheverbindungen.

Zur Bestimmung der Verschlackungsneigung eines Brennstoffs ist die Analyse des Ascheschmelzverhalten ein übliches Vorgehen. Nach DIN CEN/TS 15370-1 [45] wird der Brennstoff zunächst verascht und eine zylindrische Ascheprobe mit einer Höhe von 3-5 mm gefertigt. Anschließend erfolgt die Erwärmung der Probe, wobei im Verlauf der Analyse die nachfolgend illustrierten Zustände zu beobachten sind.

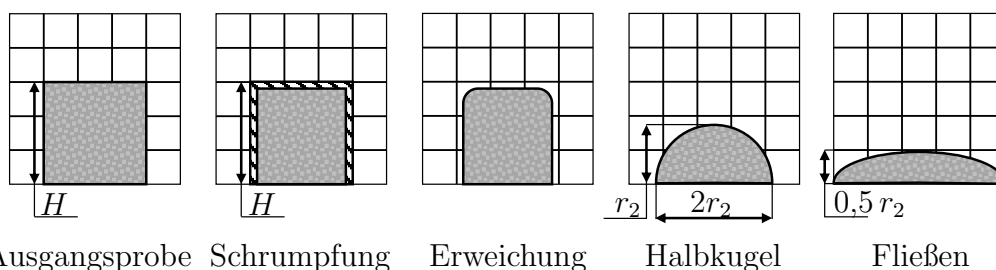


Abb. 3.3: Typische Erscheinungsbilder des Probenkörpers während der Analyse des Ascheschmelzverhaltens nach DIN CEN/TS 15370-1 ([7], S. 361)

Die Temperatur zu Beginn der Probenschrumpfung, Erweichungstemperatur, Halbkugeltemperatur sowie Fließtemperatur geben Aufschluss über das Schmelzverhalten der Asche. Häufig wird die Erweichungstemperatur, bei der ein Abrunden der Probenkanten ersichtlich wird, als Indikator der Verschlackungsneigung herangezogen. Die Erweichungstemperatur von Biomasseaschen variiert im Zusammenhang mit dem betrachteten Rohstoff und des darin befindlichen anorganischen Materials erheblich. Während stabile Kalziumverbindungen, wie beispielsweise CaO (Schmelzpunkt bei 2570 °C), zu einer Erhöhung der Erweichungstemperatur beitragen, so bewirken hohe Konzentrationen an Alkali-Verbindungen ein gegenteiliges Verhalten. In der Asche vorkommende Alkalisalze können bereits bei Temperaturen von 770 °C schmelzen [46]. Typischerweise liegt der Ascheerweichungspunkt hölzerner Biomasseaschen zwischen 1100 °C und 1400 °C [47]. Im Kontrast hierzu schmelzen die Aschen halmgutartiger Biomassen wie Heu oder Stroh bei etwa 950 °C bzw. 960 °C [32]. Diese Temperaturen liegen weit unterhalb typischer Verbrennungstemperaturen in Rostfeuerungsanlagen und können der Auslöser gravierender Schlackebildung sein. Das unterschiedliche Erweichungsverhalten von Biomasseaschen ist ein Problem, welches die Mischverbrennung von Bioenergieträgern signifikant erschwert. Ebenso spielt das unterschiedliche Schmelzverhalten der Asche eine wesentliche Rolle bei der Verbrennung stark fluktuierender Energieträger. Die zu verbrennende Holzart, der Anteil von Rinde, Laub und Nadeln nehmen nicht nur Einfluss auf die eingetragene Menge anorganischen Materials, sondern auch auf dessen Schmelzverhalten während der Verbrennung.

Mit voranschreitender Abkühlung der Rauchgase wird zunehmend die homogene Kondensation volatiler Ascheverbindungen und die damit verbundene Nukleation haftfähiger Aerosolpartikel relevant. Thermophorese und Wirbeldiffusion führen zur Anlagerung der überwiegend aus Kalium, Natrium, Chlor und Schwefel zusammengesetzten Aerosolteilchen. Dies kann an den Heizflächen die Entstehung einer klebrigen Initialschicht nach sich ziehen, welche die Anhaftung grober Flugaschepartikel verstärkt [48]. Darüber hinaus können Kondensationsprozesse an der Oberfläche abreagierter Flugaschepartikel zu einer erhöhten Haftungsneigung der Partikelfracht führen. Ablagerungsstrukturen abseits der Hauptverbrennung sind daher sowohl durch die Anhaftung von Aerosolpartikeln als auch grober Flugasche bedingt. Außerdem spielen heterogene Kondensationsprozesse an vorhandenen Heizflächen eine wesentliche Rolle für den Depositionsaufbau bei geringeren Rauchgastemperaturen.

3.3 Depositionsbildung durch heterogene Kondensation von Aschedämpfen

Hinzukommend zu den bereits erläuterten Prozessen homogener und heterogener Kondensation innerhalb der freien Strömung, spielt an den Konvektionsheizflächen die direkte Kondensation volatiler Ascheverbindungen eine Rolle. Durchqueren im Rauchgas enthaltene Aschedämpfe die die Heizflächen umgebende Grenzschicht, so bedingt der Temperaturabfall eine heterogene Kondensation der Ascheverbindungen auf den Wärmeübertragerflächen. Untersuchungen von Yin et al. [49] deuten darauf hin, dass diese Form der heterogenen Kondensation bei Heizflächentemperaturen oberhalb von 700 °C bedeutsam ist. Bei geringeren Temperaturen dominieren hingegen Aerosolenstehung und -anhaftung die Ablagerungsbildung durch volatile Ascheverbindungen. In Analogie zur Aerosolanbackung verursacht die Kondensation der Dämpfe eine klebrige Initialschicht, welche die Bindung nachfolgenden Materials verstärkt. Es wird davon ausgegangen, dass direkte Kondensation und Aerosolanhaftung insbesondere zu Beginn die Belagsentstehung entscheidend beeinflussen [50].

3.4 Chemische Reaktionen und Korrosion

Die Entstehung von Ablagerungen ist zumeist der Auslöser einer Vielzahl chemischer Prozesse innerhalb der Beläge selbst oder zwischen den Belägen und der umliegenden Gasphase sowie dem Heizflächenmaterial. Während des Belagsaufbaus kommt es beispielsweise zur Einlagerung von unverbranntem Restkoks, das im Laufe der Reisezeit jedoch durch örtlich vorkommenden Sauerstoff abgebaut wird [34]. Chemische Reaktionen zwischen abgelagerten Aschespezies oder chemische Prozesse zwischen den Belägen und der Heizfläche können zudem die Entstehung besonders niedrigschmelzender Verbindungen forcieren, welche die Anhaftung nachfolgender Partikel wesentlich verstärken. Beispielhaft ist hier die Bildung niedrigschmelzender Eutektika zwischen KCl und FeCl₂ (355 °C) sowie KCl und CrCl₂ (470 °C) aufzuführen [51]. Diese und andere chemischen Prozesse sorgen nicht nur für eine Änderung der Belageigenschaften und -komposition, sondern können zudem Ursache schwerwiegender Problemstellungen wie korrosiver Materialbeschädigungen sein. Ablagerungsbildung und beschleunigte Korrosion stehen häufig in direktem Zusammenhang, wie Abbildung 3.4 illustriert.

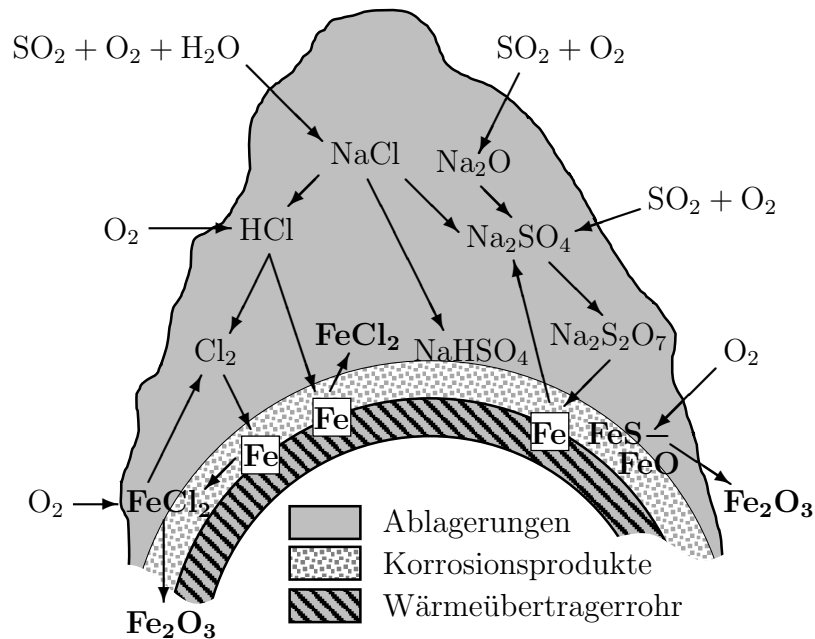


Abb. 3.4: Bekannte Mechanismen von Korrosion an Wärmeübertragerrohren nach [51] S. 290

Neben der häufig auftretenden Hochtemperatur-Chlor-Korrosion (Reaktion des Heizflächenmaterials mit gasförmigem HCl und Cl₂) können im Rauchgas vorkommende Aschedämpfe (NaCl) sowie Alkali-Chloride innerhalb der Ablagerungen zu voranschreitender Korrosion beitragen [51]. Typisch ist beschleunigte Korrosion aufgrund der Sulfatisierung in den Belägen gebundener Alkali-Chloride. Darüber hinaus kommt es durch direkte Interaktion von Alkali-Chloriden und dem Heizflächenmaterial zu korrosiver Schädigung. An der Oberfläche der Stähle angelagerte Alkali-Chloride können bereits unterhalb des Schmelzpunktes zum Materialabbau führen [52]. Es ist jedoch bekannt, dass die Anwesenheit von Schmelzen die Korrosion wesentlich verstärkt [53].

4 Literaturüberblick zur Simulation von Biomassefeuerungen

Mit dem Bestreben ein besseres Verständnis über die komplexen Zusammenhänge bei der Verbrennung fester Bioenergieträger zu erlangen, wurden in den vergangenen Dekaden unterschiedliche CFD-Simulationskonzepte entwickelt. Dieses Kapitel soll einen Überblick zu den jüngsten Entwicklungen in diesem Forschungsfeld geben.

Während die Vorgänge innerhalb der freien Strömung durch etablierte CFD-Modelle gut beschrieben werden können, so stellt eine genaue Behandlung der Festbettprozesse heute die Kernherausforderung für die Simulation von Rostfeuerungen dar. Bei Festbettverbrennung handelt es sich um ein Mehrphasenproblem, welches Stoffumwandlungsprozesse wie Trocknung, Pyrolyse, heterogene Koksreaktionen sowie homogene Gasphasenreaktionen inkludiert. Überdies spielen verschiedene Stoff- und Wärmetransportmechanismen sowie Partikelinteraktionen eine entscheidende Rolle. Sämtliche Prozesse stehen im Zusammenhang zur Betriebsführung der Anlage sowie zum verwendeten Brennstoff, der im Falle fester Bioenergieträger oft durch eine weite Streuung von Partikelgrößen und -formen sowie Komposition gekennzeichnet ist. Eine detaillierte Behandlung der Vorgänge geht deshalb mit signifikantem Berechnungsaufwand einher. Zur Lösung dieser Problemstellung wurden in den vergangenen Jahren diverse Ansätze konzipiert, wobei die meisten der publizierten Methoden den folgenden Kategorien zugeordnet werden können:

- CFD-Simulationen der freien Strömung (Freeboard) unter Gebrauch externer Festbettmodelle,
- Detaillierte Betrachtung der Festbettprozesse mittels Euler-Euler-Methode,
- Detaillierte Behandlung des Festbettes durch einen Euler-Lagrange-Ansatz.

Im Rahmen dieses Kapitels sollen diese Vorgehensweisen vorgestellt werden. Darüber hinaus werden bekannte Methoden zur Modellierung der thermochemischen Umwandlung am einzelnen Holzpartikel thematisiert sowie Ansätze zur Berechnung von Ablagerungsentstehung diskutiert.

4.1 CFD-Simulationen der freien Strömung unter Gebrauch externer Festbettmodelle

Eine detaillierte Behandlung von Festbettverbrennung innerhalb einer CFD-Simulation war bis vor einigen Jahren aufgrund limitierter Rechentechnik kaum möglich. Daher etablierte sich die Kombination aus Festbettmodell und CFD-Simulation der freien Strömung zur Berechnung betreffender Systeme. Das Bettmodell beschreibt die Umwandlung des Brennstoffs innerhalb der Schüttung und bietet Randbedingungen für die Simulation des Freeboards in Form von Geschwindigkeits-, Temperatur- und Speziesprofilen. Eine Rückkopplung zwischen der CFD-Simulation des Freeboards und dem Festbettmodell erfolgt zumeist durch Wärmetransport. Das Schema in Abbildung 4.1 veranschaulicht diesen Simulationsansatz.

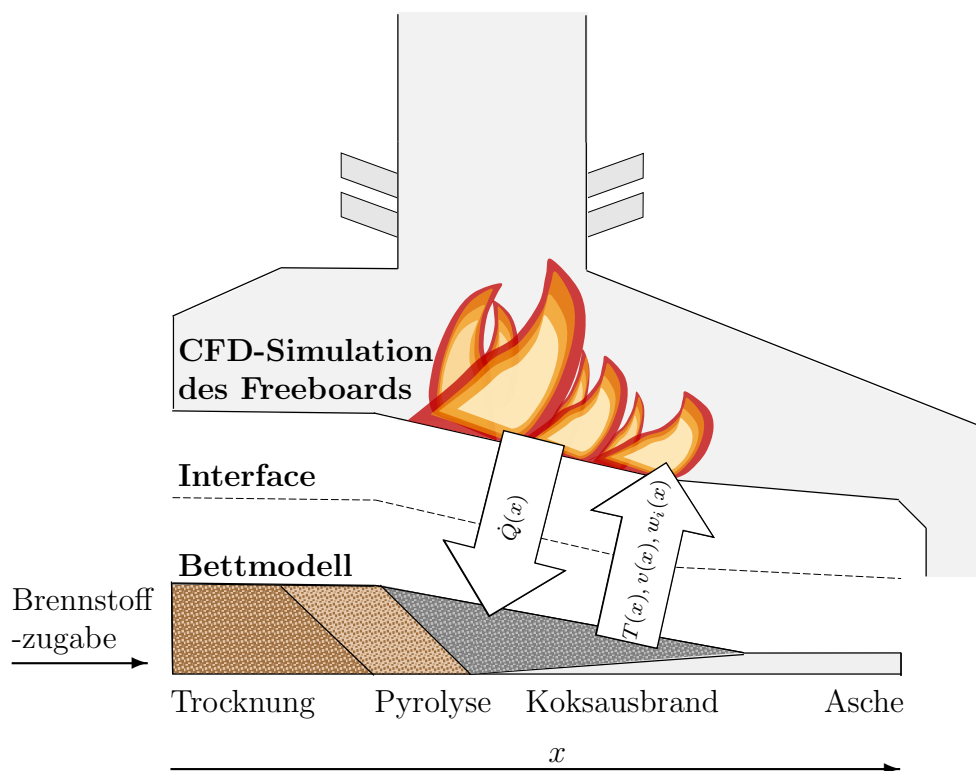


Abb. 4.1: Schematische Darstellung der CFD-Simulationen einer Rostfeuerung unter Gebrauch eines Festbettmodells

Das Programm „FLIC“ (engl.: Fluid Dynamics Incineartor Code [54]) ist ein prominentes Beispiel derartiger Ansätze. Es betrachtet das Festbett als poröses Medium

und löst einen Satz eindimensionaler Bilanzgleichungen für Kontinuität, Spezies und Energie von Gas- und Festphase entlang der Schichtdicke des Bettes. Die Prozedur wurde zur Berechnung großtechnischer Anlagen eingesetzt. Yang et al. [55] nutzen das Programm, um die Verbrennung von Stroh in einer 38 MW Rostfeuerungsanlage zu betrachten. Yin et al. [56] verwendeten das Konzept außerdem für die Simulation einer 108 MW Biomasserostfeuerungsanlage, studierten den Einfluss von Berechnungsgitter, Turbulenzmodellen, Verbrennungs- und Festbettmodellen auf die Berechnungsergebnisse und publizierten Empfehlungen zur Simulation von Feuerungsanlagen. Weiterhin beschäftigten sich Yu et al. [57] unter Gebrauch von FLIC mit der Verbrennung von Reisstroh auf einem Vibrationsrost.

Scharler et al. [58] simulierten die Verbrennung von Abfallholz in einer industriellen Rostfeuerung unter Verwendung eines empirischen Festbettmodells. Das Konzept basiert im Wesentlichen auf eindimensionalen Profilen zur Beschreibung der Brennstoffkonversion entlang des Rostes. Ein solches Modell diene auch in den Arbeiten von Schulze et al. [59, 60] als Basis zur Betrachtung von Ablagerungsbildung in Biomasserostfeuerungen. Shiehnejadhesar et al. [61] analysierten mit Hilfe des Bettmodells außerdem den Einfluss von Strahlenbildung auf die Verbrennungsprozesse innerhalb der Gasphase einer biomassebefeuchten 180 kW Pilotanlage.

Kær et al. [62, 63] betrachteten die Verbrennung in einer Stroh beschickten 33 MW Rostfeuerung und behandelten die Konversionsprozesse innerhalb der Schüttung ebenfalls durch einen Festbettansatz. Ihr Verfahren zur Behandlung der Festbettverbrennung beruht auf einem „Walking Column“-Ansatz und löst einen Satz eindimensionaler Bilanzgleichungen entlang der Betthöhe. Die Autoren untersuchten auf dieser Grundlage auch die Entstehung von Ablagerungen in strohbefeuchten Systemen [64].

Tu et al. [65] nutzten ein Festbettmodell zur Analyse einer mit Holzhackschnitzeln beschickten 32 MW Rostfeuerung. Die Autoren untersuchten damit den Einfluss von Rauchgasrückführung auf die NO_x -Emission und Anlageneffizienz.

In Bezug auf die Simulation großtechnischer Biomasserostfeuerungen ist der Gebrauch von Festbettmodellen insbesondere für ingenieurstechnische Problemstellungen die etablierte Vorgehensweise. Liegt der Interessenbereich innerhalb der freien Strömung, sind derartige Konzepte zumeist hinreichend genau. Zudem ist der Gebrauch von Festbettmodellen nur mit moderatem Berechnungsaufwand verbunden.

Für die Konversionsprozesse im Inneren der Schüttung besitzen Bettmodelle jedoch nur limitierte Aussagekraft. Wesentliche Gründe hierfür sind der Gebrauch stark vereinfachter empirischer Modelle, eine zu geringe Auflösung sowie die nicht berücksichtigte Heterogenität von Brennstoff und Schüttung.

4.2 Detaillierte Behandlung des Festbettes mit Hilfe der Euler-Euler-Methode

Verschiedene Forschergruppen beschäftigten sich in den vergangenen Jahren mit der Entwicklung von Simulationsmethoden, die detaillierte Einblicke in die Verbrennungsprozesse innerhalb eines Festbettes erlauben. Einige der publizierten Ansätze gehen auf die Euler-Euler-Methode zurück. Hierbei werden sowohl das Fluid als auch die Festphase als Kontinuum verstanden und jeweils durch einen Satz entsprechender Bilanzgleichungen beschrieben. Die Betrachtung der festen Phasen erfolgt entweder anhand eines Poröse-Medien-Modells oder als Pseudo-Fluid unter Anwendung der „Kinetischen Theorie Granularer Fluide“ (KTGF). Die zweite Vorgehensweise ist auch als Zwei-Fluid-Methode bekannt.

Die Anzahl von Arbeiten, die sich mit der Zwei-Fluid-Methode im Kontext von Rostfeuerungen auseinandersetzen ist überschaubar. Neben Rückert [66] verwendeten Kurz et al. [67] das Verfahren zur Simulation von Festbettverbrennung. Rückert untersuchte damit Abfallverbrennung in einer 0,5 MW Laboranlage sowie dem Müllheizkraftwerk Ludwigshafen. Kurz et al. beschäftigten sich hingegen mit der Verbrennung von Holzhackgut in einer 240 kW Pilotanlage.

Verschiedene Autoren griffen in der Vergangenheit auf einen Poröse-Medien-Ansatz zur Simulation von Festbettverbrennung zurück. Beispielsweise analysierten Johansson et al. [68] den Einfluss partikelinterner Gradienten auf die Modellierung von Festbettverbrennung mittels eines Poröse-Medien-Modells. Ihre Untersuchungen ergaben, dass eine Vernachlässigung intrapartikulärer Effekte zu einer höheren Freisetzungsrates von Wasser und flüchtigen Bestandteilen führt, wobei die Prozesse insgesamt in einer schmalen Reaktionszone stattfinden. Darüber hinaus ist das Temperaturprofil entlang eines Bettes durch steilere Gradienten gekennzeichnet. Sowohl Hermansson und Thunman [69] als auch Duffy und Eaton [70, 71] widmeten sich der Entstehung von Strömungskanälen in Festbetten. Letztere nutzten ein Poröse-

Medien-Modell für die Simulation von Biomasseschüttungen. Die Analysen zeigten auf, dass ein erhöhter Strömungswiderstand des Rostes zu einer besseren Luftverteilung beiträgt und die Kanalbildung innerhalb des Bettes einzudämmen vermag. Die Wirkung dieses Effektes unterliegt jedoch einer Limitierung hinsichtlich der Betthöhe. Neben Colazo et al. [72] veröffentlichten Gomez et al. [73, 74] ein effizientes Konzept für die Simulation von Biomasseverbrennung in Festbetten auf der Basis einer Poröse-Medien-Formulierung. Die Modelle können mit kommerziellen CFD-Codes gekoppelt werden und basieren auf der Lösung zusätzlicher Skalarfelder zur Berücksichtigung der Festphase. Gomez et al. betrachten insgesamt sechs Skalare, darunter Temperatur und Volumenanteil der festen Phase, Partikelvolumen sowie Dichte von Brennstofffeuchte, trockener Biomasse und Restkoks. Sie validierten das Konzept mit Messdaten aus einem Festbettbrenner. Außerdem verwendeten die Autoren ein ähnliches Vorgehen für die Simulation eines Pellet-Ofens mit Unterschubfeuerung [75].

Ein zentraler Nachteil der Euler-Euler-Methode besteht in der nicht berücksichtigten Individualität einzelner Brennstoffpartikel, sodass die Heterogenität von Brennstoff und Festbett nur bis zu einem gewissen Detailgrad abgebildet werden kann. Dies ist zum einen darauf zurückzuführen, dass der Zustand der Festphase in einer Zelle des Berechnungsgitters durch statistische Mittelwerte beschrieben wird. Zum anderen ist die disperse Phase durch eine einheitliche Partikelgröße charakterisiert. Die Behandlung polydisperser Schüttungen ist zwar möglich, erfordert allerdings die Einführung zusätzlicher Phasen, was den Berechnungsaufwand durch weitere Bilanzgleichungen erhöht. Dennoch ist die Nutzung der Euler-Euler-Methode bei Betrachtung einer geringen Anzahl von Phasen als weniger rechenintensiv einzuschätzen als vergleichbare Simulationen mit dem nachfolgend dargestellten Euler-Lagrange-Ansatz.

4.3 Detaillierte Behandlung des Festbettes mit Hilfe des Euler-Lagrange-Ansatzes

Im Kontrast zum Euler-Euler-Konzept wird der Festbrennstoff beim Euler-Lagrange-Ansatz als diskrete Phase behandelt und ist durch eine festgelegte Anzahl von Partikeln repräsentiert. Der zentrale Vorteil solcher diskreten Partikelmethode bzw. Partikelmodelle liegt in der erheblich gesteigerten Detailgüte, da Konversion und

Bewegung eines jeden Teilchens berechnet werden können. Aus diesem Grund wird das Euler-Lagrange-Verfahren auch als Einzelpartikel-Methode bezeichnet [76]. Eine Anwendbarkeit dieses Konzeptes auf typische Festbettbedingungen besteht jedoch nur dann, wenn die Dynamik des granularen Materials durch geeignete Modelle Berücksichtigung findet. Diesbezüglich ist die von Cundall and Strack [77] eingeführte DEM Grundlage diverser Simulationskonzepte der vergangenen Jahre. Sie erlaubt eine Beschreibung des mechanischen Verhaltens von Schüttgütern und wird heute vielfältig eingesetzt. Die Anwendung reicht von Silos, Förder- und Filtertechnik bis hin zu verfahrenstechnischen Apparaten und Verbrennungssystemen. Die DEM basiert auf einer Behandlung binärer Kollisionsereignisse auf Partikelebene und der Ermittlung von Kontaktkräften zwischen interagierenden Teilchen. Dies macht jedoch eine Berechnung sämtlicher Kontakte innerhalb der Schüttung erforderlich. Zudem besteht die Notwendigkeit einer zeitabhängigen Behandlung des Simulationsproblems. Vor allem für große Partikelanhäufungen sind DEM-Simulationen deshalb rechenintensiv. Aufgrund der Vielzahl gekoppelter Teilmodelle gilt dies insbesondere für die Kombination von DEM und CFD zur Simulation reagierender Gas-Feststoff-Systeme, wie Biomassefestbetten. Gekoppelte CFD-DEM-Simulationen von Festbettverbrennungsprozessen sind daher bislang lediglich Gegenstand der Forschung. Eine genauere Erläuterung zu den grundlegenden Berechnungsprinzipien der Diskrete Elemente Methode wird in Kapitel 5.1.3 vorgenommen.

Peters et al. [78, 79] entwickelten eine diskrete Partikelmethode für die thermochemische Umwandlung von Holz unter Festbettbedingungen. Während Bewegung und Konversion der Brennstoffteilchen durch das Partikelmodell beschrieben werden, so erfolgt die Berechnung der Gasströmung in den Hohlräumen der Schüttung durch CFD-Programme. Die Autoren verwendeten die Methode zur Simulation der Konversionsprozesse auf einem Vorschubrost.

Basierend auf den Arbeiten von Peters et al. entstand die CFD-DEM-Umgebung „XDEM“ (engl.: eXtended Discrete Element Method). XDEM wurde von Mahmoudi et al. genutzt, um Teilprozesse der thermochemischen Umwandlung in Biomassefestbetten zu studieren, darunter Trocknung [80], Pyrolyse [81] sowie Selbstzündung [82]. Außerdem beschäftigten sich die Autoren mit der Simulation von Biomasseverbrennung in einem Festbettreaktor [83] sowie auf einem Vorschubrost im Labormaßstab [84].

Simsek et al. [85] publizierten eine Methode für gekoppelte CFD-DEM-Simulationen für die Abfallverbrennung in großtechnischen Rostfeuerungen. Das Brennstoffbett wird als Ansammlung von Partikeln behandelt, wobei die Beschreibung von Bewegung und Verbrennung einzelner Brennstoffpartikel durch einen eigenen 2D DEM-Code erfolgt. Die DEM-Berechnung ist hierbei bidirektional mit einer stationären CFD-Simulation der freien Strömung oberhalb des Bettes gekoppelt. Eine ähnliche Prozedur wurde weiterhin von Waldner et al. [86], Brosch et al. [87] sowie Wissing et al. [88] zur Untersuchung großtechnischer Müllverbrennung im MHKW-Frankfurt (57 MW) genutzt. Letztgenannte befassten sich mit einer Sensitivitätsstudie zum Einfluss von Brennstoffkomposition, Brennstoffmassenstrom, Heizwert, Partikelgrößenverteilung und Strahlung aus dem Freeboard auf den Verbrennungsprozess. Zudem betrachteten die Autoren das Mischungsverhalten des Brennstoffs auf unterschiedlichen Rostsystemen.

Mehrabian et al. [89] entwickelten eine diskrete Partikelmethode zur Beschreibung der Verbrennungsprozesse von Holzteilchen. Auf Grundlage dieses Verfahrens beschäftigten sich Mehrabian et al. mehrfach mit der Simulation von Festbettverbrennung [90–92], wobei das Konzept unter anderem für die Berechnung einer holzgefeuerten 180 kW Vorschubrost-Pilotanlage eingesetzt wurde. Um den Berechnungsprozess effizienter zu gestalten, verzichteten die Autoren in ihren Arbeiten auf eine aufwendige Behandlung der Bettdynamik mittels DEM und verwendeten stattdessen alternative Ansätze. Bspw. wurde in [90] ein hybrides Euler-Euler/Euler-Lagrange-Verfahren eingesetzt. Während die Verbrennung der Holzteilchen auf Basis des Partikelmodells bestimmt wurde, so erfolgte die Behandlung der Bettdynamik durch eine überlagerte Zwei-Fluid-Methode.

Sämtliche in diesem Kapitel vorgestellten CFD-DEM-Konzepte für die Simulation von Festbettverbrennung basieren auf der Betrachtung kugelförmiger Brennstoffteilchen. Es existieren jedoch verschiedene Verfahren, die ebenso eine Simulation nicht-kugelförmiger Partikel erlauben. Hierzu zählen beispielsweise „Polyeder“- oder „Multi-Sphere“-Modelle [93–95]. Der Gebrauch derartiger Methoden bedingt allerdings einen immens hohen Berechnungsaufwand, der eine Nutzung für sehr große Partikelansammlungen derzeit ausschließt. Die Simulation komplexer Teilchenformen im Kontext von Verbrennungsprozessen erfordert außerdem adäquate Modelle zur Beschreibung von Stoff- und Wärmetransport sowie der thermochemischen Konversion. Die Verbrennung von Teilchen mit komplexer Gestalt ist jedoch im Detail

noch nicht verstanden. Weiterhin besitzen in Festbettverbrennung eingesetzte Energieträger häufig eine weitere Streuung von Teilchengröße und -form, deren messtechnische Erfassung nur schwierig umzusetzen ist. Die Betrachtung kugelförmiger Brennstoffteilchen ist deshalb bislang die übliche Vorgehensweise. Einige Arbeiten, um mit Wiese et al. [96] und Mohseni et al. [97] nur zwei zu nennen, beschäftigten sich dennoch mit Festbettverbrennung auf der Grundlage nicht-kugelförmiger Partikel. Beide Forschergruppen untersuchten die Verbrennung in einem Pelletofen unter Betrachtung zylinderförmiger Partikel.

Die vorliegende Arbeit bezieht sich zwar auf die Simulation von Biomasseverbrennung in Festbetten, der Vollständigkeit wegen sei jedoch darauf hingewiesen, dass CFD-DEM-Konzepte auch erfolgreich für die Simulation von Wirbelschichtanlagen Verwendung finden [98–101]. Die Einsatzmöglichkeiten für CFD-DEM-Methoden sind vielfältig und bieten im Vergleich mit zuvor genannten Simulationspraktiken einen signifikant höheren Detailgrad, da Verbrennung und Bewegung individueller Brennstoffteilchen analysiert werden können. Dies erfordert allerdings geeignete Submodelle, die eine umfassende Beschreibung der Effekte am einzelnen Partikel erlauben. Allen voran sind adäquate Modellansätze für Stoff- und Wärmetransport sowie zur Behandlung der thermochemischen Konversionsprozesse essentiell für die Betrachtung von Verbrennungsvorgängen. Der nachfolgende Abschnitt widmet sich deshalb geeigneten Modellen zur Beschreibung der Verbrennung am Einzelpartikel.

4.4 Modellierung der Verbrennungsprozesse am Einzelpartikel

Wie zuvor unter Abschnitt 2.2 aufgezeigt wurde, umfasst die Verbrennung fester Bioenergieträger verschiedene Teilprozesse wie Trocknung, Pyrolyse und heterogene Restkoksreaktionen. Betrachtet man ein einzelnes Brennstoffteilchen, so können diese Prozesse in Abhängigkeit der örtlichen Bedingungen sowie Partikeleigenschaften sequentiell oder simultan ablaufen. Sehr kleine Brennstoffteilchen sind zumeist durch ein weitgehend homogenes Temperaturfeld im Inneren gekennzeichnet. Die Partikeltemperatur und der Fortschritt der Umwandlungsprozesse werden maßgeblich durch die äußere Wärmezufuhr bestimmt. Derartige Teilchen bezeichnet man

als thermisch dünn. Sie sind durch Biot-Zahlen

$$Bi = \frac{\alpha l_p}{\lambda_p} \quad (4.1)$$

von weniger als 0,1 gekennzeichnet und die Subprozesse der Thermochemie folgen einem sequentiellen Muster. Der überwiegende Teil der Partikel innerhalb einer Rostfeuerung ist jedoch durch deutlich höhere Biot-Zahlen charakterisiert und gilt als thermisch dick. Für diese Brennstoffbestandteile kommt es zur Ausprägung intrapartikulärer Temperaturgradienten, die den Fortschritt der Konversion entscheidend beeinflussen. Aufgrund des heterogenen Temperaturfeldes innerhalb der Teilchen können die einzelnen Umwandlungsprozesse überlagert stattfinden. Dieses Verhalten ist durch adäquate Modellansätze zu behandeln.

Die meisten der in diesem Zusammenhang publizierten Methoden setzen auf eine eindimensionale Auflösung intrapartikulärer Prozesse. Üblich ist außerdem die Betrachtung vereinfachter Teilchenformen, wie Kugeln, Zylinder oder ebene Platten. Zentraler Bestandteil der Berechnung sind instationäre Bilanzgleichungen für Masse, Spezies und Energie von Fluid und Festphase sowie häufig eine partikelinterne Impulsbilanz. Die Grundgleichungen sind hierbei mit Untermodellen zur Berechnung von Stoff- und Wärmetransport sowie Trocknung, Pyrolyse und Koksausbrand gekoppelt. Eine ausführliche Darstellung der hierfür gängigen Submodelle folgt später in Kapitel 5.2.

Thunman et al. [102] publizierten ein effizientes Modell zur Beschreibung der Verbrennung einzelner Holzteilchen auf der Basis eines eindimensionalen Ansatzes. Hierbei wird das Partikel entsprechend der Konversionsstufen in die folgenden vier Zonen unterteilt: nasse Biomasse, trockene Biomasse, Koks und Asche. Die Umwandlungsprozesse laufen auf den Grenzflächen zwischen den Zonen ab, wie in Abbildung 4.2 illustriert. Der zentrale Vorteil der Prozedur liegt in dem vergleichsweise moderaten Berechnungsaufwand durch die geringe Stützstellenanzahl. Aus diesem Grund genießt das Konzept hohe Popularität und fand in den vergangenen Jahren vielfach Anwendung durch verschiedene Autoren. Mehrabian et al. [89], Poteiro et al. [103, 104] sowie Ström und Thunman [105] nutzten es für die Simulation thermochemischer Konversion einzelner Holzpartikel. Weiterhin wurde das Diskretisierungsschema sowohl von Johansson et al. [68] als auch Gomez et al. [73, 74] und Mehrabian et al. [90–92] herangezogen, um die Verbrennung in Biomassefestbetten zu studieren.

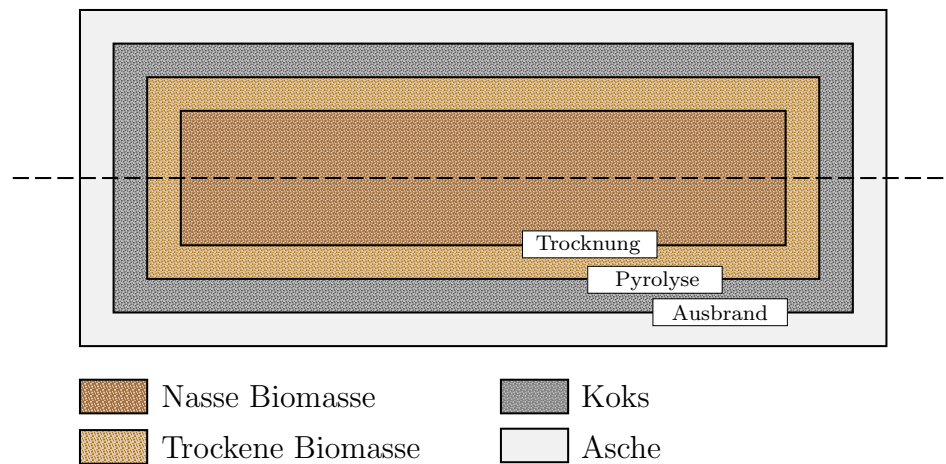


Abb. 4.2: Diskretisierungsschema für ein zylindrisches Holzpartikel, angelehnt an [102] S. 32

In diesem Zusammenhang wurde das Konzept mehrfach mit ANSYS Fluent gekoppelt [73, 74, 89–92, 105] und besitzt in Hinblick auf die vorliegende Arbeit deshalb hohe Relevanz. Grundsätzlich zählen Konzepte unter Verwendung dieses Diskretisierungsschemas zur Kategorie der „Sharp Interface Models“ (SIM) [106]. SIM unterliegen der Vorstellung, dass die Umwandlungsprozesse in schmalen Reaktionszonen stattfinden, deren räumliche Ausdehnung im Vergleich zur Teilchengröße vernachlässigbar ist. Diese Bedingung ist erfüllt, wenn die Zeitskalen chemischer Prozesse geringer sind als jene von intrapartikulärem Stoff- und Wärmetransport [105]. Dies mag auf größere Partikel zutreffen, der Einsatz derartiger Methoden hinsichtlich kleiner Partikel ist jedoch problembehaftet. Somit ist das Verfahren nicht uneingeschränkt auf die gesamte Bandbreite der Partikelfracht in einer industriellen Rostfeuerung anwendbar und in Hinblick auf die Zielstellung der vorliegenden Arbeit nicht geeignet.

Neben den bis hierhin aufgeführten Arbeiten entwickelten auch andere Forschergruppen eindimensionale Partikelmodelle, um die Verbrennungsprozesse an einzelnen Holzpartikeln zu studieren. Lu et al. [107, 108] beschäftigten sich in diesem Zusammenhang mit der thermochemischen Konversion von Pappelholz. Das publizierte Modell basiert auf insgesamt 12 Speziesbilanzen, einer Energie- sowie Kontinuitätsbilanz und ist damit als vergleichsweise rechenintensiv einzuschätzen. Haseli et al. [109] publizierten ein ähnliches 1D-Modell zur Analyse der Holzverbrennung am Einzelpartikel. Das Verfahren der Forschergruppe löst dabei insgesamt 10 Bi-

lanzgleichungen für Partikel- und Gasspezies. Hinzu kommen zusätzlich eine Energie sowie Impulsbilanz. Li et al. [110] veröffentlichten hingegen ein weniger aufwendiges Partikelmodell. Ihr Vorgehen basiert auf einer Energiebilanz sowie Speziesbilanzen für Brennstofffeuchte, trockene Biomasse, Koks, Asche und flüchtige Komponenten. Da sowohl Haseli et al. als auch Li et al. ihre Modelle lediglich mittels Massenverläufen validierten, ist eine Bewertung der Modellgüte vor dem Hintergrund der vorliegenden Arbeit schwierig.

Auch in Bezug auf CFD-DEM-Verfahren zur Simulation von Festbettverbrennung stellen eindimensionale Partikelmodelle das etablierte Vorgehen zur Behandlung des Partikelabbrandes dar. Sowohl die Arbeiten von Peters et al. [78, 79] als auch Mahmoudi et al. [80–84] legen eine eindimensionale Behandlung partikelinterner Geschehnisse zu Grunde. Bspw. basiert das Partikelmodell in [84] auf einem umfassenden Satz Bilanzgleichungen für Masse, Energie und Impuls sowie diverser Partikel- und Gasspezies (CO , CO_2 , H_2O , H_2 , CH_4 , aktives und inertes Teer). Die Grundgleichungen sind hierbei mit detaillierten Modellansätzen für Trocknung, Pyrolyse, Koksabbrand sowie Stoff- und Wärmetransport gekoppelt. Ebenso greifen Brosch et al. [87] und Wissing et al. [88] in ihren Analysen zur großtechnischen Festbettverbrennung auf eindimensionale Partikelmodelle zurück. Ihre Ansätze unterliegen der Annahme sehr hoher Biot-Zahlen und dem Sachverhalt, dass der Fortschritt von Trocknung und Pyrolyse durch intrapartikulären Wärmetransport bestimmt wird. Die Umsatzrate dieser Konversionsprozesse wird daher durch einen vereinfachten thermischen Ansatz beschrieben, wohingegen der langsamere Koksabbrand durch ein reaktionskinetisches Modell behandelt wird. Der Diskussion der SIM entsprechend, ist die Verwendung thermischer Modelle bei Betrachtung sehr kleiner Partikel allerdings problembehaftet.

Obwohl in der Literatur mehrheitlich 1D-Partikelmodelle zur Behandlung der Biomasseverbrennung genutzt werden, so sind vereinzelt Verfahren mit mehrdimensionaler Auflösung vorzufinden. Beispielhaft sei auf die Arbeit von Wiese et al. [96] zur Pelletverbrennung mit dreidimensionaler Diskretisierung der Holzteilchen und die Arbeit von Yang et al. [111] zur Verbrennung eines einzelnen Holzteilchens mit einer zweidimensionalen Auflösung hingewiesen. Es ist davon auszugehen, dass mehrdimensionale Partikelmodelle im Zuge neuer Rechentechnik in Zukunft vermehrt zum Einsatz kommen. Aufgrund des höheren Berechnungsaufwands ggü. 1D-Ansätzen beschränkt sich die Anwendung derzeit jedoch auf geringe Partikelzahlen.

4.5 Numerische Simulationen der Ablagerungsbildung

Für ein besseres Verständnis über die Teilvorgänge der Ablagerungsentstehung in Kraftwerken wurden in den vergangenen Jahrzehnten bereits mehrfach numerische Simulationen genutzt. Viele der Arbeiten beziehen sich allerdings auf Kohlestaubfeuerungen, siehe bspw. [44, 112–116]. Im Bereich der großtechnischen Biomasseverbrennung ist die Anzahl relevanter Arbeiten überschaubar.

Mueller et al. [117] beschäftigten sich mit CFD-Simulationen zur Depositionsentstehung in holzgefeuerten Wirbelschichten. Die Forschergruppe konzentrierte sich auf die Bildung von Ansätzen im Freeboardbereich aufgrund der Anhaftung aus dem Wirbelbett stammender Aschepartikel. Zur Behandlung der inerten Partikelfracht griffen die Autoren auf eine Euler-Lagrange-Formulierung zurück. Betrachtet wurde eine lineare Größenverteilung des emittierten Materials, wobei Partikel mit einer Ausdehnung zwischen 0,5 μm und 50 μm Berücksichtigung fanden. Die Bewertung der Partikelhaftungsneigung stützte sich auf umfassende Brennstoffanalytik und thermodynamische Gleichgewichtsberechnungen zum Schmelzphasenanteil der Aschepartikel. Eine detaillierter Abgleich zwischen Simulation und Beobachtungen aus einer Referenzanlage ist allerdings nicht Bestandteil der Arbeit.

Kær et al. [64, 118] untersuchten mittels numerischer Verfahren die Ablagerungsbildung in industriellen, strohbetriebenen Rostanlagen. Mittels Festbettmodell und CFD-Simulation der freien Strömung studierten die Autoren sowohl die Belagsentstehung durch anhaftende Aschepartikel als auch durch Aschedämpfe. Als Repräsentant volatiler Aschebestandteile wurde KCl herangezogen, dessen Freisetzungsrates aus dem Brennstoffbett mit Hilfe einer stofftransportlimitierten Ansatzes bestimmt wurde. Die Bewegung und Anhaftung von Aschepartikeln wurde mittels Lagrange'schem Ansatz bestimmt, wobei die Haftungsneigung der Partikelfracht durch ein statistisches Konzept [119] auf der Grundlage von Haftwahrscheinlichkeiten ermittelt wurde. Hierfür wurden sowohl eine Berechnung des Schmelzphasenanteils als auch Viskositätsberechnungen vorgenommen. Die verwendete Größenverteilung der Aschepartikel geht auf elektronenmikroskopische Analysen von Rostasche aus einem realen System zurück. Obwohl das Verfahren zur Analyse der Belagsbildung in großtechnischen Systemen genutzt wurde, fehlt ein umfassender Abgleich der Belagsstruktur zu Beobachtungen aus einem Referenzsystem.

Forstner et al. [120] entwickelten eine umfassende Methodik zur Bestimmung von Ablagerungsbildung bei der Festbettverbrennung von Biomasse. Grundlage des präsentierten Verfahrens bot ein empirisches Festbettmodell [58]. Die Autoren berücksichtigen in ihren Untersuchungen den Depositionsaufbau durch die Anhaftung grober Flugaschepartikel und die Kondensation volatiler Aschebestandteile. Mit KCl, $(\text{KCl})_2$, K_2SO_4 , K_2CO_3 , NaCl, NaCl_2 , Na_2SO_4 , PbCl_2 , PbO, ZnCl_2 und ZnO wurden insgesamt 11 flüchtige Ascheverbindungen betrachtet. Die Bewegung und Anhaftung von Flugascheteilchen berechneten die Autoren ebenfalls mit Hilfe eines Euler-Lagrange-Ansatzes sowie dem statistischen Ansatz, der zuvor auch durch Kær et al. Gebrauch fand. Für silikatreiche Aschepartikel erfolgte die Ermittlung der Haftungsneigung durch einen Viskositätsansatz, während für salzhaltige Teilchen der Schmelzphasenanteil bestimmt wurde. Grundsätzlich berücksichtigten die Autoren Partikel im Größenbereich 1-50 μm . Den einzelnen Größenklassen wurde eine Verteilung der Aschekomposition überlagert. Die Freisetzung der Aschepartikel erfolgt in Abhängigkeit der Teilchengröße in Analogie zur Volatilität verschiedener Gase. Da es sich im Kern um eine rein theoretische Arbeit handelt, wurden die Ergebnisse keinem Vergleich zu Beobachtungen aus einem Realssystem unterzogen.

Schulze et al. [59] publizierten eine ähnliche Prozedur zur Ablagerungsbildung in Biomasseverbrennungsanlagen. Auch sie betrachteten die Belagsentstehung durch Kondensation flüchtiger Ascheverbindungen sowie die Anhaftung grober Flugasche. In Analogie zur Arbeit von Forstner et al. basiert die Berechnung der Partikelanbackung auf einer Euler-Lagrange-Methode, kombiniert mit einem statistischen Ansatz zur Ermittlung der Partikelhaftwahrscheinlichkeiten. Die aus dem Brennstoffbett freigesetzte Partikelfracht wurde als silikatreich eingestuft und ihre Haftungsneigung durch einen Viskositätsansatz bestimmt. Das Größenspektrum der betrachteten Partikel reicht von 20 μm bis 600 μm . In einer späteren Veröffentlichung erweiterten Schulze et al. [60] das Verfahren um einen zusätzlichen Mechanismus, der Nukleation und Anlagerung von Aerosolpartikeln. Ein Abgleich zwischen Simulation und einem Realsystem erfolgte durch die abgelagerte Masse, die Ablagerungskomposition sowie die Emission von Feinpartikeln und grober Flugasche. Das Modell berechnete die Ablagerungsbildung deutlich zu hoch, was laut der Autoren vor allem auf eine Überbestimmung der Partikelhaftungsneigung zurückzuführen ist [60].

Garba et al. [121] untersuchten die Sulfatisierung flüchtiger Alkaliverbindungen und deren Auswirkung auf die Belagsbildung an den Heizflächen einer Biomasserost-

feuerung. Die Forschergruppe entwickelte einen reduzierten Reaktionsmechanismus (36 Spezies und 137 Elementarreaktionen) für die Beschreibung der Alkalisulfatisierung. Das Verfahren wurde mit dem von Tomeczek und Wacławiak [44] publizierten Ablagerungsmodell, welches Belagsbildung als Zusammenspiel von Partikelanhaftung und Kondensationsprozessen berechnet, verbunden. Auf diese Weise analysierten die Autoren den Belagsaufbau an Überhitzerheizflächen abseits der Hauptverbrennung von Baumwollstroh in einer großtechnischen Rostfeuerung (10 MW). Hinsichtlich der Partikelanhaftung betrachteten die Autoren Teilchen im Bereich 1-110 μm , die entsprechend einer aus der Literatur entnommen Größenverteilung für Altholz und Holzhackgut eingebracht wurden. Ein detaillierter Abgleich der errechneten Depositionsstruktur zu Beobachtungen bzw. Messungen wurde auch hier nicht vorgenommen.

Es ist bekannt, dass die Bedeutung kondensierbarer Aschebestandteile hinsichtlich des Depositionsaufbaus mit sinkender Rauchgastemperatur zunimmt. Insbesondere für die Belagsentstehung an den Konvektionsheizflächen können volatile Ascheverbindungen große Relevanz besitzen, da sich wegen der Bildung klebriger Beläge die Auffangrate von Flugascheteilchen bedeutend erhöhen kann. Aufgrund der hohen Temperaturen ist Ablagerungsentstehung im Primär- und Sekundärverbrennungsbereich jedoch vor allem durch die Anlagerung grober Partikel begründet [59, 120]. Aschedampfkondensation ist hier von untergeordneter Bedeutung. Insgesamt ist der Beitrag der Partikelanhaftung zur Ablagerungsmasse zumeist um eine oder mehrere Größenordnungen gegenüber der Aschedampfkondensation erhöht [59, 64]. Zur Behandlung der Partikelanhaftung wird in den Studien [59, 64, 117, 118, 120, 121] ausschließlich von abreagierter Flugasche ausgegangen. Die Voraussetzung einer inerten Partikelfracht birgt jedoch einige Nachteile, da sich die Haftungsneigung des Materials lediglich aus dem Temperatur- und Strahlungsfeld der Anlage sowie dem Haftungsmodell und dessen Abhängigkeit zur Aschekomposition ergibt. Insbesondere für Brennstoffe mit hohem Feinanteil ist jedoch mit der Emission teilkonvertierter Brennstoffteilchen zu rechnen, bei denen es aufgrund anhaltender Konversion zu Temperaturdifferenzen zwischen der Partikelfracht und dem Fluid kommt.

Ein kürzlich an der Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg durchgeführtes Forschungsvorhaben [122] beschäftigte sich mit dem Einfluss des Feinanteils auf die Entstehung von Belägen in unterschiedlichen Biomasseverbrennungsanlagen. Dabei wurde sowohl auf numerische Verfahren als auch Brennstoffanalytik

zurückgegriffen. Mittels Siebanalyse erfolgte eine Bestimmung der Brennstofffeinanteile (< 5 mm) unterschiedlicher Bioenergieträger. Im Fall der betrachteten Holzhackschnitzelprobe belief sich dieser auf etwa 13 %. Im Extremfall (Straßenbegleitgrün) waren es sogar 26 % der Probenmasse. Im Rahmen der Forschung wurde außerdem eine Methodik für CFD-Simulationen der Belagsbildung in Rostfeuerungen entwickelt, die für mehrere industrielle Anlagen Verwendung fand. Der Transport teilverbrannter Brennstoffpartikel (Koksteilchen) sowie deren Verbrennung wurden mit Hilfe eines Euler-Lagrange-Ansatzes und einem nulldimensionalen Abbrandmodell beschrieben. Die Basis für die Ermittlung der Haftungsneigung bilden ein Viskositätsmodell sowie thermodynamische Gleichgewichtsberechnungen zum Schmelzphasenanteil. Die Einbringung der Partikelfracht erfolgt direkt am Rost. Die Festbettverbrennung wird hierbei jedoch stark vereinfacht behandelt und lediglich durch Profile am Rost angenähert. Zudem fehlt ein detaillierter Vergleich zwischen der simulierten Belagsbildung und realen Beobachtungen.

4.6 Fazit

Typischerweise werden eindimensionale Partikelmodelle genutzt, um den Abbrand von Holzteilchen zu berechnen. Dies gilt sowohl für die Betrachtung einzelner Brennstoffteilchen als auch Festbetten. Die bislang in diesem Zusammenhang publizierten Methoden besitzen jedoch entweder Einschränkungen bezüglich der Anwendbarkeit auf die gesamte Bandbreite der Partikel in einer Rostfeuerung, oder sind als zu rechenintensiv einzustufen um eine große Partikelansammlung im Rahmen eines CFD-DEM-Ansatzes zu behandeln. Grundsätzlich sind CFD-DEM-Konzepte bislang Gegenstand der Forschung und beziehen sich mehrheitlich auf Festbettsysteme im Labormaßstab. Dies ist einerseits der Untersuchung grundlegender Verbrennungsphänomene, andererseits einer umfassenden Validierung neuer Methodik geschuldet. Zudem ist die Darstellung großtechnischer Festbettprozesse auf der Grundlage der DEM besonders rechenintensiv. Zur Untersuchung von Belagsbildung in industriellen Rostfeuerungen werden derartige Ansätze deshalb bislang nicht verwendet. So ist die Kombination aus Festbettmodell und CFD-Simulation des Freeboards noch immer das etablierte Vorgehen in Bezug auf die Berechnung großtechnischer Rostfeuerungen. CFD-Simulationen zur Belagsbildung in betreffenden Systemen werden vorrangig eingesetzt, um Teilprozesse des Depositionsaufbaus zu

analysieren und besser zu verstehen. Sie dienen der Untersuchung von Mechanismen und der Identifikation stark belasteter Bereiche. Ein umfassender Vergleich zwischen Simulationen und Beobachtungen aus einem Referenzsystem erfolgt zumeist nicht. Ein möglicher Grund hierfür ist in der schlechten Zugänglichkeit vieler Anlagen zu sehen. Darüber hinaus ist ein Vergleich zwischen der stationären Simulation eines bekannten Betriebszustandes und dem Belagsbild nach einer mehrmonatigen Reisezeit, gekennzeichnet von variierenden Betriebszuständen, grundsätzlich schwierig. Erwähnenswert ist außerdem, dass numerische Simulationen bislang kaum zur Optimierung betroffener Anlagen genutzt werden.

Belagsbildung durch anhaftende Flugteilchen wird in der Literatur zumeist auf der Basis eines Euler-Lagrange-Ansatzes und stochastischer Ablagerungsmodelle berechnet. Für silikatreiche Aschen ist es üblich, die Haftwahrscheinlichkeit der Partikelfracht durch Viskositätsmodelle zu beschreiben. Die hierbei festzulegende kritische Viskosität ist hinsichtlich einer Quantifizierung der Beläge von zentraler Bedeutung. Mit Ausnahme gebildeter Aerosole ist es gängig, die Partikelfracht als abreagierte Flugasche zu behandeln. Eine Berücksichtigung teilkonvertierter Brennstofffeinpartikel ist im Kontext von Festbettmodellen schwierig. In der Mehrzahl der vorgestellten Arbeiten werden diese deshalb nicht berücksichtigt. Aufgrund des zugrunde gelegten Bettmodells erfolgt die Einbringung der Partikel innerhalb der CFD-Simulationen deutlich vereinfacht. Die Partikel folgen meist einer vordefinierten Größenverteilung, die auf experimentelle Untersuchungen von Flug- oder Rostasche zurück geht. Inwiefern diese den tatsächlichen Gegebenheiten zum Zeitpunkt der Verbrennung entspricht, ist unklar.

Um die Verbrennung im Festbett und dem Freeboard einer industriellen Rostfeuerung zu analysieren, wird in der vorliegenden Arbeit ein vollständig gekoppeltes CFD-DEM-Verfahren inklusive eines reduzierten 1D-Partikelmodell entwickelt. Auf dieser Basis sollen erstmals die aus dem Brennstoffbett emittierte Partikelfracht und ihr Einfluss auf den Belagsaufbau näher spezifiziert werden. Das errechnete Belagsbild wird einem umfassenden Vergleich mit realen Beobachtungen unterzogen und es sollen Optimierungsansätze für das Realsystem abgeleitet werden.

5 Methodik

Da kein Standardverfahren für gekoppelte CFD-DEM-Simulationen von Biomasse-rostfeuerungen existiert, besteht die Notwendigkeit einer Neuentwicklung. Grundsätzlich kommen für die Lösung der Problemstellung sowohl kommerzielle Simulationssoftware als auch freie Programme infrage. Für die Einbindung erforderlicher Modelle resultiert in beiden Fällen verhältnismäßig hoher Programmieraufwand. Dieser wird für die Umsetzung mit freier Software jedoch signifikant höher eingeschätzt. Zudem fordert die Simulation eine Kopplung diverser Untermodelle, die einen stabilen Lösungsalgorithmus sowie einige Flexibilität hinsichtlich des numerischen Gitters voraussetzen. Kommerzielle Programme sind in diesem Zusammenhang besser erprobt und agieren zuverlässiger. Das kommerzielle Programm ANSYS Fluent wurde in einer Vielzahl von Studien erfolgreich für die Simulation von Biomasseverbrennung und Rostfeuerungen eingesetzt [55–57, 60, 64, 74, 88, 89, 91, 105]. Es enthält etablierte Modelle für Mehrphasenströmung, homogene Chemie und Wärmeübertragung. Darüber hinaus erlaubt die Software dem Nutzer mit Hilfe von User-Defined Functions (UDFs) die Implementierung eigener Modelle. Ein weiterer Vorteil besteht in dem bereits vorhandenem Dense Discrete Phase Model (DDPM), welches als Grundlage des zu implementierenden CFD-DEM-Konzeptes fungiert. Aus den genannten Gründen fiel die Wahl auf ANSYS Fluent, das zu dem Zeitpunkt in der Programmversion 15.0 vorlag.

Das DDPM stellt eine erweiterte Form des in ANSYS Fluent als Discrete Phase Model (DPM) bezeichneten Euler-Lagrange-Ansatzes dar. Ursprünglich konzipiert für Strömungen mit geringer Partikelbeladung ist das DPM lediglich bis zu einem Partikelvolumenanteil von etwa 12% [123] anwendbar und für die Simulation dichter granularer Systeme, wie Festbetten, ungeeignet. Für derartige Anwendungen wurde das DDPM eingeführt. Einerseits bietet es die Möglichkeit die in dichten Bereichen dominierenden Partikelinteraktionen zu behandeln. Andererseits wird das Volumen der dispersen Phase in den Bilanzgleichungen des Fluides berücksichtigt, sodass sich die Anwesenheit von Teilchenansammlungen entsprechend auf die Strömung auswirkt.

Eine Betrachtung von Verbrennung und Bewegung sämtlicher Partikel in einer großtechnischen Rostfeuerung ist mit der Leistung derzeitiger Rechentechnik kaum umsetzbar. Zur Reduktion der Anzahl zu betrachtender Teilchen wird deshalb auf einen Partikel-Paket-Ansatz zurückgegriffen. Identische Partikel werden hierbei zu einer handhabbaren Anzahl von Paketen zusammengefasst, deren Bewegung durch das Rechengebiet verfolgt wird. Bewegung und Verbrennung werden zwar auf der Grundlage eines Einzelpartikels bestimmt, allerdings auf die restlichen Teilchen innerhalb des Paketes angewendet. Ebenso wird die Interaktion von diskreter Phase und dem umgebenden Fluid als Summe der Interaktion der einzelnen Teilchen betrachtet. Eine Ausnahme zu dieser Vorgehensweise bildet jedoch die Berechnung von Partikelinteraktionen auf der Basis der DEM. Da der Brennstoff physisch durch Partikelpakete repräsentiert ist, bilden selbige die Grundlage der Kontaktkraftberechnung. Das Verhalten des granularen Materials innerhalb der Schüttung wird daher durch die Verwendung von Partikelpaketen approximiert.

5.1 Partikelbewegung

Wie zuvor in Abschnitt 4.3 erklärt, ist die Betrachtung kugelförmiger Partikel ein gängiges Vorgehen für gekoppelte CFD-DEM-Simulation und soll auch die Grundlage für die Berechnungen innerhalb der vorliegenden Arbeit sein. Die Bestimmung der Teilchenbewegung unterliegt der Bewegungsgleichung 5.1 sowie der ersten Ableitung der Partikelposition nach der Zeit in Gleichung 5.2.

$$m_p \frac{d\vec{v}_p}{dt} = \sum \vec{F}_p \quad (5.1)$$

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{v}_p \quad (5.2)$$

Laut der Impulsbilanz in Gleichung 5.1 stellt sich die Teilchenbewegung als Resultat der Partikelträgheit sowie der Summe angreifender Kräfte ein. In Abhängigkeit des zu behandelnden Systems beeinflussen unterschiedliche Kräfte den Transport von Teilchen in partikelbeladener Strömung. Ein Überblick zu diesem Thema ist z. B. in den Arbeiten von Sommerfeld [124] und Zhu et al. [125] vorzufinden.

Während für ausreichend schwere Partikel innerhalb des Brennstoffbettes Gravitation und Kontaktkräfte mit anderen Partikeln sowie Systemgrenzen dominieren, so

spielt die durch das Fluid wirkende Widerstandskraft zusätzlich eine zentrale Rolle für den Transport leichter Partikel. Letztere verlassen das Bett und bewegen sich in der freien Strömung, wobei ihre Flugbahn maßgeblich durch Gravitation und Widerstandskraft bestimmt wird. Wie zuvor erläutert, sind an den Brennkammerwänden und Heizflächen auftreffende Flugteilchen primär das Resultat von Inertial Impaction. Darüber hinaus kann Wirbeldiffusion eine Bedeutung für kleinere Partikel beigemessen werden. Thermophorese besitzt lediglich Relevanz für Teilchen mit einer Ausdehnung von wenigen Mikrometern. Jene werden in der vorliegenden Arbeit nicht betrachtet, sodass die Behandlung von Thermophorese entfällt.

5.1.1 Widerstandskraft

Nach Sommerfeld [124] ist die zwischen Fluid und Partikel wirkende Widerstandskraft \vec{F}_D in vielen Fällen partikelbeladener Strömung bestimmend für den Teilchen-transport. Die Kraft resultiert aus Reibung sowie einem Formwiderstand und wird für die Partikel der dispersen Phase mit

$$\vec{F}_D = \frac{18\mu_f C_D Re_p}{\rho_p d_p^2} m_p (\vec{v}_f - \vec{v}_p) \quad (5.3)$$

errechnet [123]. Hierbei sind Re_p und C_D die Partikel-Reynolds-Zahl sowie der Widerstandsbeiwert, welche durch

$$Re_p = \frac{\rho_f d_p |\vec{v}_p - \vec{v}_f|}{\mu_f} \quad (5.4)$$

und

$$C_D = a + \frac{b}{Re_p} + \frac{c}{Re_p^2} \quad (5.5)$$

definiert sind. Gleichung 5.5 gilt für die Betrachtung glatter Kugeln unter Gebrauch der Korrelation von Morsi und Alexander [126]. Die Modellkonstanten a , b und c besitzen eine Abhängigkeit zur Reynolds-Zahl. Neben der Widerstandskraft selbst berücksichtigt Gleichung 5.3 auch den Einfluss von Wirbeldiffusion. Hier ist \vec{v}_f die instantane Fluidgeschwindigkeit, bestehend aus dem Mittelwert und einem fluktuierenden Anteil der Geschwindigkeit zur Behandlung des Transportes durch Turbulenz. Die Geschwindigkeitsfluktuationen werden mit Hilfe einer stochastischen Methode, dem Discrete Random Walk Model aus ANSYS Fluent ermittelt.

5.1.2 Auftrieb und Gravitation

Die aus Auftrieb und Gravitation resultierende Kraft wird in ANSYS Fluent mit

$$\vec{F}_G = m_p \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p} \right) \vec{g} \quad (5.6)$$

bestimmt [123]. Wegen der sehr unterschiedlichen Dichten von disperser Festphase und dem gasförmigen Fluid besitzt der Auftrieb jedoch kaum Einfluss.

5.1.3 Partikelkontaktkräfte (DEM)

Partikelinteraktionen können innerhalb des DDPM durch ein zusätzliches Modell berücksichtigt werden, welches den grundlegenden Prinzipien der Diskrete Elemente Methode unterliegt. Die Diskrete Elemente Methode ist auch unter den Bezeichnungen „Distinct Element Method“ oder „Soft-Sphere Approach“ bekannt und gehört zur Kategorie der diskreten Partikelmethoden. Die DEM geht primär auf die Arbeit von Cundall und Strack [77] zurück und erlaubt die Berechnung granularer Medien durch die Betrachtung individueller Teilchen und den zwischen diesen wirkenden Kontaktkräften. Die Partikel werden dabei als starre Körper angesehen. Die im Zuge einer Kollision auftretende Verformung wird als virtuelle Überschneidung behandelt und dient als Basis zur Berechnung wirkender Normal- und Tangentialkräfte. Die Ermittlung der Kollisionskräfte kann durch unterschiedliche Kontaktgesetze erfolgen, um den mechanischen Eigenschaften eines Schüttgutes Rechnung zu tragen. Eine Diskussion sämtlicher Kontaktmodelle übersteigt den Rahmen dieser Arbeit, weshalb auf die entsprechende Fachliteratur verwiesen wird (Di Renzo und Di Maio [127], Kruggel-Emden et al. [128,129] und Luding [130]).

Wie eingangs erwähnt, wird die Dynamik des Brennstoffbettes in der vorliegenden Arbeit durch die Nutzung sphärischer Pakete angenähert. Die auf ein bestimmtes Paket innerhalb der Schüttung wirkende Kontaktkraft \vec{F}_C ist das Resultat sämtlicher binärer Kollisionsereignisse zwischen dem Paket und seiner Umgebung und den dabei entstehenden Normal- und Tangentialkräften, siehe Gleichung 5.7 und 5.8.

$$\vec{F}_C = \sum_{j=1, i \neq j}^{n_K} \vec{F}_{i,j} \quad (5.7)$$

$$\vec{F}_{i,j} = \vec{F}_{i,j}^n + \vec{F}_{i,j}^t \quad (5.8)$$

Innerhalb des in ANSYS Fluent enthaltenen DEM-Modells wird die Berechnung der Normalkraft $\vec{F}_{i,j}^n$ auf der Basis eines linearen Feder-Dämpfermodells vorgenommen. Das Modell zählt zu den am häufigsten genutzten Kontaktmodellen und gehört zur Kategorie der visko-elastischen Konzepte. Die zwischen zwei kollidierenden Teilchen wirkende Normalkraft wird hierbei als Zusammenspiel einer elastischen Feder sowie eines viskosen Dämpfers behandelt, wie in Abbildung 5.1 illustriert.

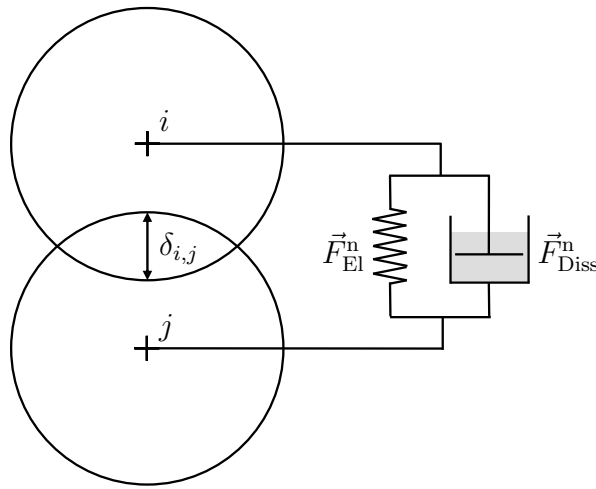


Abb. 5.1: Lineares Feder-Dämpfermodell für die Normalkraftberechnung

Entsprechend der Feder-Dämpfer-Analogie setzt sich die Normalkraft aus zwei Termen zusammen, einem mit der Überschneidung verbundenen elastischen Anteil sowie einem von der Überschneidungsrate abhängigen Dämpfungsterm.

$$\vec{F}_{i,j}^n = \vec{F}_{El}^n + \vec{F}_{Diss}^n = k_n \delta_{i,j} \vec{n}_{i,j} + \gamma_n \vec{v}_{n,i,j} \quad (5.9)$$

In Gleichung 5.9 ist k_n die Normalfedersteifigkeit. Die virtuelle Überschneidung wird anhand der Position und Radien der Partikelpakete wie folgt bestimmt

$$\delta_{i,j} = |\vec{x}_{pp,j} - \vec{x}_{pp,i}| - (r_{pp,j} + r_{pp,i}) . \quad (5.10)$$

Weiterhin sind der Einheitsvektor in Normalenrichtung $\vec{n}_{i,j}$ sowie die Relativgeschwindigkeit $\vec{v}_{n,i,j}$ mit

$$\vec{n}_{i,j} = \frac{(\vec{x}_{pp,j} - \vec{x}_{pp,i})}{|\vec{x}_{pp,j} - \vec{x}_{pp,i}|} \quad (5.11)$$

bzw.

$$\vec{v}_{n,i,j} = (\vec{v}_{pp,i,j} \cdot \vec{n}_{i,j}) \vec{n}_{i,j} \quad (5.12)$$

gegeben. Zur Berechnung des Dämpfungskoeffizienten γ_n in Gleichung 5.9 wird auf die Methode von Tsuji et al. [131] zurückgegriffen.

$$\gamma_n = \frac{-2m_r \ln(\eta)}{t_C} \quad (5.13)$$

Der Dämpfungskoeffizient besitzt eine Abhängigkeit zur reduzierten Masse des Kollisionspaares m_r , der Dauer des Kontaktereignisses t_C sowie dem Restitutionskoeffizienten η . Erstere ist mit

$$m_r = \frac{m_{pp,i} m_{pp,j}}{m_{pp,i} + m_{pp,j}} \quad (5.14)$$

definiert. Die Kontaktzeit kann unter Gebrauch des Verlustfaktors $f_1 = \sqrt{\pi^2 + \ln(\eta)^2}$ hingegen mit

$$t_C = f_1 \sqrt{\frac{m_r}{k_n}} \quad (5.15)$$

ermittelt werden. Sie besitzt eine Abhängigkeit zur Masse der beteiligten Kollisionspartner sowie den Stoßparametern k_n und η . Bei Betrachtung sehr kleiner Teilchen bzw. Paketmassen resultiert in Abhängigkeit der Kollisionsparameter eine geringe Kontaktdauer, die durch eine adäquate Anzahl von Partikelzeitschritten aufgelöst werden muss. Dies ist insbesondere für polydisperse Schüttungen eine Herausforderung, da sich die Zeitschrittweite an der kleinsten Masse orientiert. Des Weiteren muss die Wahl der Federkonstante so erfolgen, dass auch für größere Paketmassen eine unphysikalische Überschneidung vermieden wird. Der Gebrauch von Paketen ist in diesem Zusammenhang vorteilhaft, da die Bandbreite zu betrachtender Massen verringert werden kann. Durch die Zusammenfassung kleiner Partikel erlaubt der Paketansatz zudem eine Erhöhung der Zeitschrittweite.

Abschließend ist zu erklären, dass die in Gleichung 5.8 vorkommende Tangentialkraft $\vec{F}_{i,j}^t$ im Rahmen des DEM-Modells durch ein Reibungsgesetz der Form

$$\vec{F}_{i,j}^t = \mu_{p,r} |\vec{F}_{i,j}^n| \vec{t}_{i,j} \quad (5.16)$$

bestimmt wird. $\mu_{p,r}$ und $\vec{t}_{i,j}$ repräsentieren hierbei den Reibungsbeiwert sowie den Richtungsvektor der Tangentialkraft.

5.2 Partikelmodell für die thermochemische Umwandlung

Zur Behandlung der direkten thermochemischen Umwandlung eines stückigen biogenen Festbrennstoffs wurde ein reduziertes Partikelmodell entwickelt. Das Verfahren stützt sich auf eine eindimensionale Auflösung intrapartikulärer Effekte und basiert auf der Betrachtung einfacher Teilchengemetrien. Unter Annahme sphärischer Partikel ist das Konzept im Kontext von CFD-DEM-Simulationen großtechnischer Rostfeuerungen nutzbar. Innerhalb der Modellberechnungen wird ein Satz eindimensionaler instationärer Bilanzgleichungen für verschiedene Partikelspezies und Energie gelöst, die mit Hilfe einer Finite-Volumen-Methode approximiert werden. Die Grundgleichungen sind mit Untermodellen für Trocknung, Pyrolyse und Restkoksreaktionen gekoppelt. Überdies enthält das Modell eine Schnittstelle zur Berechnung der thermischen Interaktion zwischen einem Brennstoffteilchen und seiner Umgebung. Eine schematische Darstellung des 1D-Partikelmodells ist in Abbildung 5.2 illustriert.

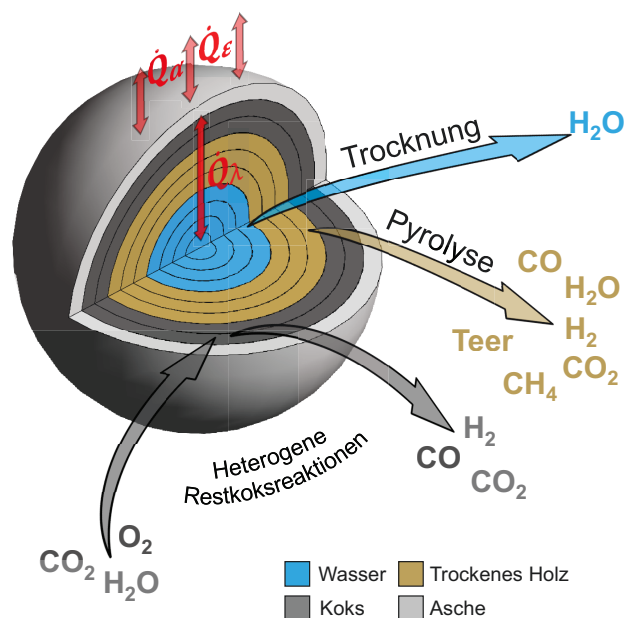


Abb. 5.2: Schematische Darstellung des 1D-Partikelmodells zur Behandlung von Verbrennungsvorgängen an Holzteilchen

Das Verfahren unterliegt verschiedenen Annahmen, wobei im Wesentlichen die Folgenden aufzuführen sind:

- (1) Holzteilchen sind isotrop und ihre Verbrennung kann durch eindimensionale Modellansätze abgebildet werden.
- (2) Eindimensionale Modellansätze besitzen unter den heterogenen Umgebungsbedingungen eines Brennstoffbettes Gültigkeit.
- (3) Es herrscht ein lokales thermodynamisches Gleichgewicht zwischen den Phasen innerhalb eines Teilchens.
- (4) Homogene Gasphasenreaktionen im Inneren der Partikel sind vernachlässigbar.
- (5) Die Freisetzung von Gasspezies wird lediglich durch die Modelle für Trocknung, Pyrolyse und Ausbrand bestimmt. Freigesetzte Gasspezies verlassen das Partikel instantan.
- (6) In einem Kontrollvolumen des Partikels folgen die thermochemischen Umwandlungsprozesse einem sequentiellen Verhalten.

Im Rahmen dieses reduzierten Partikelmodells wird auf die Lösung partikelinterner Gasspeziesbilanzen sowie eine intrapartikuläre Impulsbilanz verzichtet. Der verminderte Berechnungsaufwand, der mit diesem Vorgehen resultiert, ist eine grundlegende Voraussetzung für eine Anwendbarkeit auf große Partikelanhäufungen. Für den Fall, dass es zu einer signifikanten Überschneidung von Trocknung, Pyrolyse und Koksumwandlung kommt, wird jedoch hinsichtlich der Koksreaktionen eine Beeinflussung durch das gewählte Vorgehen erwartet. Aus dem Zentrum austretende Gasspezies, primär H_2O und CO_2 , würden intern zu einer stärkeren Vergasung des Kokes beitragen. Im Ergebnis der endothermen Prozesse ist mit längeren Ausbrandzeiten zu rechnen. Zum anderen bedeuten austretende Gase einen erhöhten Widerstand für das Eindringen gasförmiger Reaktanden aus der umgebenden Gasphase, was die Koksumwandlung zusätzlich erschwert. Diese Phänomene können durch das Modell nicht abgebildet werden. Sie sind nur indirekt berücksichtigt, da sich aufgrund der Freisetzung der vergasenden Spezies eine mit H_2O und CO_2 angereicherte Atmosphäre um das Teilchen ergibt.

5.2.1 Bilanzgleichungen

Innerhalb des Partikelmodells werden eindimensionale instationäre Bilanzgleichungen für Energie und neun Partikelspezies (Cellulose, aktive Cellulose, Hemicellulose, aktive Hemicellulose, Lignin, aktives Lignin, Koks, Asche und flüssiges Wasser) gelöst, siehe Gleichung 5.17 und 5.18.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_p c_{p,p} T_p) + \nabla \cdot (\rho_f \vec{v}_f h_f) = \nabla \cdot (\lambda_{p,\text{eff}} \nabla T_p) + \sum_{n=1}^{n_{\text{PR}}} \dot{r}_n \Delta h_R \quad (5.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_p w_{p,i}) = \sum_{n=1}^{n_{\text{PR}}} \dot{r}_{n,i} \quad (5.18)$$

Das zentrale Element der Berechnung ist die Energiebilanz 5.17 zur Auflösung des intrapartikulären Temperaturfeldes. Hier sind ρ_p , $c_{p,p}$ und T_p die Dichte, spezifische Wärmekapazität sowie die Temperatur des Partikels. Des Weiteren bezeichnen ρ_f , \vec{v}_f und h_f die Dichte, die Geschwindigkeit und die spezifische Enthalpie ein- und austretender Gasspezies. Außerdem repräsentiert $\lambda_{p,\text{eff}}$ die effektive Wärmeleitfähigkeit für den Wärmetransport innerhalb des Partikels. Der letzte Term in der Energiebilanz berücksichtigt endotherme sowie exotherme Effekte im Zuge von Trocknung, Pyrolyse und Koksreaktionen, wobei Δh_R die Reaktionsenthalpie (Verdampfungsenthalpie Δh_V im Fall der Trocknung) des jeweiligen Prozesses darstellt. Bildung und Verbrauch von Partikelspezies mit dem Massenanteil $w_{p,i}$ werden hingegen einzig durch die Umsatzraten der thermochemischen Prozesse $\dot{r}_{n,i}$ definiert, wie die Speziesbilanz 5.18 darlegt. Eine genaue Darstellung der hierfür integrierten Untermodelle folgt im späteren Verlauf der Arbeit.

Im Inneren eines Partikels geschieht der Wärmetransport vornehmlich durch Leitung. Bei höheren Temperaturen wird zusätzlich Wärmestrahlung bedeutsam. Um dies zu berücksichtigen, hat sich der Gebrauch einer effektiven Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{p,\text{eff}}$ etabliert, die sich in Anlehnung an [10] aus einer mittleren Wärmeleitfähigkeit des Partikelmaterials $\bar{\lambda}_p$ sowie einem Strahlungsanteil λ_ϵ zusammensetzt.

$$\lambda_{p,\text{eff}} = \bar{\lambda}_p + \lambda_\epsilon \quad (5.19)$$

Die Wärmeleitfähigkeit des vorhandenen Festmaterials wird durch Volumenmittlung bestimmt. Der Strahlungsanteil wird nach [107] hingegen mit

$$\lambda_\varepsilon = \frac{\epsilon_p \sigma_B T_p^3 d_{\text{Pore}}}{\varepsilon_p} \quad (5.20)$$

errechnet, wobei ϵ_p , d_{Pore} und ε_p die Porosität, den mittleren Porendurchmesser und den Emissionskoeffizienten des Partikels bezeichnen. Der Strahlungsanteil wird lediglich in Bereichen des Partikels betrachtet, in denen trockene Biomasse, Restkoks und Asche dominieren.

Zur Lösung der Gleichung 5.17 werden sowohl für das Partikelzentrum ($x = 0$) als auch die Oberfläche eines Teilchens ($x = x_{\text{max}}$) Neumann-Randbedingungen verwendet.

$$-\lambda_{\text{p,eff}} \frac{\partial T_p}{\partial x} \bigg|_{x=0} = 0 \quad (5.21)$$

$$-\lambda_{\text{p,eff}} \frac{\partial T_p}{\partial x} \bigg|_{x=x_{\text{max}}} = \dot{q}_\alpha + \dot{q}_\varepsilon \quad (5.22)$$

Für das Partikelzentrum wird eine Symmetrie-Randbedingung genutzt, sodass Wärmetransport über die Systemgrenze unterbunden wird. An der Partikeloberfläche werden Modelle für die thermische Interaktion eines Partikels mit seiner Umgebung implementiert. Hierbei repräsentiert \dot{q}_α den Wärmetransport zwischen einem Partikel und der umliegenden Gasphase aufgrund von Konvektion. Der Ausdruck \dot{q}_ε bezeichnet die Wärmestromdichte ein- bzw. ausgehender Wärmestrahlung, die sich aus der Interaktion des Partikels und dem umgebenden Strahlungsfeld ergibt. Externe Wärmeleitung zwischen benachbarten Partikeln wird in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt. Dies kann mit der geringen Wärmeleitfähigkeit des Holzes und dem damit vergleichsweise schwachen Wärmetransport durch Leitung begründet werden.

Die im Rahmen des Partikelmodells durchzuführenden Berechnungen erfordern unterschiedliche Materialeigenschaften der vorkommenden Partikelspezies. Hierzu zählen Dichte, Wärmeleitfähigkeit und spezifische Wärmekapazität. Überdies werden Emissionskoeffizienten und verschiedene Größen zur Beschreibung der Porenstruktur von Holz, Koks und Asche benötigt. Sämtliche in diesem Zusammenhang verwendete Daten sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

Tab. 5.1: Materialeigenschaften der Partikelspezies sowie charakteristische Daten der Porenstruktur

Größe	Einheit	Wert / Gleichung	Quelle
Dichte			
Trockenes Holz	kg m^{-3}	590 (Buche), 545 (Pappel)	[83, 107]
Wasser	kg m^{-3}	998,19	[96]
Koks	kg m^{-3}	200	[132]
Asche	kg m^{-3}	250	
Wärmekapazität			
Trockenes Holz	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	$1500 + T_p$	[10]
Wasser	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	4183,0	[96]
Koks	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	$420 + 2,09 T_p - 6,85 \cdot 10^{-4} T_p^2$	[10]
Asche	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	$420 + 2,09 T_p - 6,85 \cdot 10^{-4} T_p^2$	[10]
Wärmeleitfähigkeit			
Trockenes Holz	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	$0,056 + 2,6 \cdot 10^{-4} T_p$	[107]
Wasser	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	0,58	[96]
Koks	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	0,071	[107]
Asche	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	1,2	[107]
Emissionskoeffizient			
Trockenes Holz	—	0,85	[107]
Koks	—	0,95	[107]
Asche	—	0,70	[107]
Porosität			
Holz	—	0,6	
Koks	—	0,9	
Asche	—	0,9	[89]
Porendurchmesser			
Holz	μm	50	[133]
Koks und Asche	μm	100	[133]

5.2.2 Externer Wärmetransport

Der Wärmetransport zwischen einem Brennstoffpartikel und seiner Umgebung spielt eine entscheidende Rolle für das Aufheizen und Abkühlen des Teilchens sowie den Fortschritt der thermochemischen Umwandlung. Die Wärmeübertragung beeinflusst damit maßgeblich den Verbrennungsprozess. Der Wärmetransport in Schüttungen

basiert auf unterschiedlichen Mechanismen und kann sowohl Strahlung und Konvektion als auch Wärmeleitung inkludieren. Ein Überblick über Wärmetransportprozesse in durchströmten Schüttgütern ist beispielsweise in den Arbeiten von Gnielinski [134] und Hobbs et al. [135] zu finden. In der vorliegenden Arbeit werden Strahlung und Konvektion als die dominierenden Prozesse der Wärmeübertragung zwischen einem Partikel und seiner Umgebung betrachtet. Wie bereits erwähnt, ist der Einfluss externer Wärmeleitung gegenüber Strahlung und Konvektion im Falle biogener Festbrennstoffe vernachlässigbar.

Wärmestrahlung

In Verbrennungssystemen kommt Wärmestrahlung eine besondere Bedeutung zu, da sie aufgrund der hohen Temperaturen oft die Wärmeübertragung bestimmt. In Festbettfeuerungen kann ein einzelnes Partikel mit anderen Teilchen, umgebenden Oberflächen sowie der Gasphase im Strahlungsaustausch stehen. In großskaligen Anwendungen ist insbesondere der Strahlungsaustausch zwischen dem Festbett und der darüber befindlichen Flamme sowie aufgeheizten Brennraumwänden essentiell für den Fortschritt der Verbrennung. Vor allem für die Trocknung des frischen Brennstoffs spielt die zugeführte Strahlungswärme eine große Rolle [136].

Innerhalb der hier betrachteten Verbrennungssysteme wird das Strahlungsfeld, welches sowohl von Partikeln als auch dem Fluid beeinflusst wird, auf der Grundlage des in ANSYS Fluent enthaltenen Discrete Ordinates Model (DOM) berechnet. Eine tiefergehende Erläuterung zu diesem Strahlungsmodell folgt an späterer Stelle unter Kapitel 5.4.

Bei Annahme eines Brennstoffteilchens, welches vollständig von dem vorhandenen Strahlungsfeld umschlossen ist, ergibt sich die auf das Teilchen wirkende Wärmestromdichte mit

$$\dot{q}_\varepsilon = \frac{\dot{Q}_\varepsilon}{A_p} = \varepsilon_p \sigma_B (T_\varepsilon^4 - T_p^4) . \quad (5.23)$$

\dot{Q}_ε und A_p bezeichnen hierbei den Strahlungswärmestrom und die Oberfläche des Brennstoffpartikels. T_ε ist die lokale Strahlungstemperatur, welche sich aus der Lösung des DOM ergibt. Der Emissionskoeffizient der Partikeloberfläche ε_p wird in Abhängigkeit des Konversionsfortschritts gewählt und geht aus den in Tabelle 5.1 aufgeführten Werten hervor.

Konvektive Wärmeübertragung

Der konvektive Wärmetransport zwischen einem Partikel und dem umgebenden Fluid ist durch die Beziehung

$$\dot{q}_\alpha = \frac{\dot{Q}_\alpha}{A_p} = \alpha(T_f - T_p) \quad (5.24)$$

gegeben. Dabei ist T_f die Temperatur der umschließenden Gasphase und α der Wärmeübergangskoeffizient, welcher mit Hilfe der Nusselt-Zahl Nu sowie der Wärmeleitfähigkeit des Fluides λ_f ermittelt wird.

$$\alpha = \frac{Nu \lambda_f}{d_p} \quad (5.25)$$

In Festbetten ist die mittlere Nusselt-Zahl gegenüber der Umströmung eines einzelnen Partikels deutlich erhöht, woraus eine gesteigerte Wärmeübertragung durch Konvektion resultiert. Dieses Verhalten liegt in der Vielzahl von Umlenkungen und Verwirbelungen innerhalb der Schüttung begründet [137]. Die Berechnung von Nu erfolgt unter Gebrauch empirischer Korrelation von Gnielinski [138, 139], siehe Gleichung 5.26 - 5.29.

$$Nu = f_a Nu_{\text{Kugel}} \quad (5.26)$$

$$Nu_{\text{Kugel}} = 2 + \sqrt{Nu_{\text{Lam}}^2 + Nu_{\text{Turb}}^2} \quad (5.27)$$

$$Nu_{\text{Lam}} = 0,664 \sqrt{Re_p} \sqrt[3]{Pr} \quad (5.28)$$

$$Nu_{\text{Turb}} = \frac{0,037 Re_p^{0,8} Pr}{1 + 2,443 Re_p^{-0,1} (Pr^{2/3} - 1)} \quad (5.29)$$

Der in Gleichung 5.26 vorkommende Formfaktor f_a steht in Verbindung zum Volumenanteil der Festphase und berücksichtigt die höhere Wärmeübertragung innerhalb des durchströmten Haufwerks. Für Partikel in der freien Strömung beträgt f_a hingegen eins. Des Weiteren sind in den obigen Gleichungen Nu_{Turb} und Nu_{Lam} die turbulente und laminare Nusselt-Zahl sowie Pr die Prandtl-Zahl.

5.2.3 Externer und intrapartikulärer Stofftransport

Wegen der Analogie zur konvektiven Wärmeübertragung folgt an dieser Stelle die Erläuterung der Berechnungsmethoden zum konvektiven Stofftransport zwischen der Partikeloberfläche und der umgebenden Gasphase. Sowohl das im nachfolgenden Abschnitt vorgestellte Trocknungsmodell als auch das Teilmodell zur Beschreibung der heterogenen Restkoksreaktionen inkludieren externen Materialtransport und benötigen die Bereitstellung eines geeigneten Stofftransportkoeffizienten.

Der Stoffübergangskoeffizient β_i einer Gasspezies i kann mittels Sherwood-Zahl Sh und einem mittlerem Diffusionskoeffizienten $D_{i,m}$ bestimmt werden.

$$\beta_i = \frac{Sh D_{i,m}}{d_p} \quad (5.30)$$

Ähnlich zu den Korrelationen der Nusselt-Zahl in Gleichung 5.26 - 5.29 ergibt sich die Sherwood-Zahl mit den Beziehungen

$$Sh = f_a Sh_{\text{Kugel}} , \quad (5.31)$$

$$Sh_{\text{Kugel}} = 2 + \sqrt{Sh_{\text{Lam}}^2 + Sh_{\text{Turb}}^2} , \quad (5.32)$$

$$Sh_{\text{Lam}} = 0,664 \sqrt{Re_p} \sqrt[3]{Sc} , \quad (5.33)$$

$$Sh_{\text{Turb}} = \frac{0,037 Re_p^{0,8} Sc}{1 + 2,443 Re_p^{-0,1} (Sc^{2/3} - 1)} . \quad (5.34)$$

Die turbulente und laminare Sherwood-Zahl sind mit Sh_{Turb} und Sh_{Lam} bezeichnet. Des Weiteren sind Sc die Schmidt-Zahl und f_a in Analogie zum vorherigen Abschnitt der Faktor für effektivere Transportvorgänge innerhalb der Schüttung.

Grundlage zur Ermittlung des Stofftransportkoeffizienten bildet der mittlere Diffusionskoeffizient $D_{i,m}$, der im Rahmen des Partikelmodells als binärer Koeffizient zwischen der betrachteten Gasspezies i und Luft errechnet wird [140].

$$D_{i,m} = \frac{1,013 \cdot 10^{-2} T_p^{1,75} \left(\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_{\text{Luft}}} \right)^{1/2}}{p \left[\nu_i^{1/3} + \nu_{\text{Luft}}^{1/3} \right]^2} \quad (5.35)$$

Neben externem Stofftransport ist auch partikelinterne Diffusion bedeutsam für den Fortschritt der Umwandlungsprozesse und wird in den Modellen zur Behandlung von Brennstofftrocknung, Pyrolyse und Koksabbbrand entsprechend berücksichtigt. Der diffusionsbedingte Speziestransport in einem ausbrennenden Biomasseteilchen kann sowohl durch molekulare Diffusion als auch Knudsen-Diffusion erfolgen. Der Diffusionskoeffizient D_i ergibt sich daher aus dem molekularen Diffusionskoeffizienten $D_{i,m}$ sowie dem Knudsen-Diffusionskoeffizienten $D_{i,Kn}$ mit

$$\frac{1}{D_i} = \frac{1}{D_{i,Kn}} + \frac{1}{D_{i,m}} . \quad (5.36)$$

Der Koeffizient für Knudsen-Diffusion wird durch die nachfolgende Beziehung ermittelt [141].

$$D_{i,Kn} = \frac{d_{\text{Pore}}}{3} \sqrt{\frac{8RT_p}{\pi M_i}} \quad (5.37)$$

Aus der porösen Struktur des Partikelinneren resultiert ein erhöhter Diffusionswiderstand, dem durch die Definition eines effektiven Diffusionskoeffizienten Rechnung getragen wird. Der effektive Diffusionskoeffizient zur Behandlung von Porendiffusion ist laut Hayes und Kolaczowski [140] mit

$$D_{i,\text{eff}} = \frac{\epsilon_p}{\tau_p} D_i \quad (5.38)$$

gegeben. Hierbei sind ϵ_p und τ_p die Porosität sowie Tortuosität des porösen Mediums. Für den Trocknungsvorgang wurde die Tortuosität frischer Biomasse auf 1,0 gewählt. Für den Koksabbbrand wird der obige Ausdruck für den effektiven Diffusionskoeffizienten hingegen durch

$$D_{i,\text{eff}} = \epsilon_p^2 D_i \quad (5.39)$$

angenähert [142]. Die verwendeten Porositäten wurden bereits bei den Materialeigenschaften in Tabelle 5.1 vorgestellt.

5.2.4 Modellierung der Brennstofftrocknung

Für die Modellierung des Trocknungsvorgangs sind in der Literatur unterschiedliche Verfahren verfügbar, die im Wesentlichen in drei Kategorien untergliedert werden können: reaktionskinetische Modelle, Gleichgewichtsmodelle sowie energetische Konzepte [143, 144].

Reaktionskinetische Modelle

Bei kinetischen Modellen, wie beispielsweise von Chan et al. [145] verwendet, wird der Trocknungsprozess durch eine heterogene Reaktion erster Ordnung beschrieben und die Rate mittels eines Arrhenius-Ansatzes berechnet. Wesentliche Vorteile kinetischer Ansätze bestehen in der einfachen Implementierung und der Möglichkeit zur Betrachtung der Trocknung von freiem und gebundenem Wasser mittels separater Reaktionen. Ein grundsätzlicher Nachteil der Methode besteht allerdings darin, dass die experimentell zu bestimmenden Kinetikparameter in Verbindung zu den Versuchsbedingungen stehen und nicht frei auf andere Bedingungen übertragbar sind. Zudem zeigte Peters [146] auf, dass energetische Modelle in Bezug auf die Trocknung großer Partikel besser agieren als reaktionskinetische Ansätze.

Energetische Modelle

Energetische Konzepte gehen davon aus, dass der Trocknungsvorgang bei einer konstanten Temperatur abläuft. Erreicht die Partikeltemperatur eine vorgegebene Verdampfungstemperatur T_V (meist $T_V = 373,15 \text{ K}$ bei $p = 1 \text{ atm.}$) so wird sämtliche, dem Prozess zugeführte, Energie für den Prozess verbraucht. Das Partikel verbleibt isotherm bis der Trocknungsvorgang abgeschlossen ist. Bei energetischen Konzepten ist der Trocknungsvorgang limitiert durch Wärmetransport. Stofftransportprozesse werden nicht betrachtet, sodass angenommen wird, dass Wasserdampf das Partikel unmittelbar verlässt [147]. Energetische Konzepte sind die am meisten verbreiteten Modelle zur Beschreibung von Trocknungsvorgängen an Biomasseteilchen und wurden durch diverse Autoren genutzt, siehe [17, 74, 80, 89, 99, 103, 111, 148]. Sie sind das etablierte Verfahren zur Behandlung schneller Trocknungsprozesse unter Verbrennungsbedingungen.

Gleichgewichtsmodelle

Verfahren dieser Kategorie basieren auf einem thermodynamischen Gleichgewicht zwischen Wasserdampf und Wasser innerhalb der Porenstruktur eines porösen Teilchens [149]. Dabei entspricht der Wasserdampfpartialdruck dem Sättigungsdampf-

druck bei der vorhandenen Temperatur und die Wasserdampfkonzentration im Porensystem kann mittels des Gesetzes idealer Gase ermittelt werden. Zumeist wird angenommen, dass die Trocknungsrate stofftransportlimitiert ist. Gleichgewichtsmodelle werden typischerweise genutzt, um langsame Trocknungsprozesse bei geringen Temperaturen zu berechnen [147, 150], fanden durch verschiedene Autoren aber ebenfalls Anwendung für Verbrennungsbedingungen, siehe [83, 84, 151, 152].

Kombiniertes Trocknungsmodell dieser Arbeit

Aufgrund der sehr unterschiedlichen lokalen Umgebungsbedingungen in großtechnischen Feuerungen sowie individuellen Eigenschaften der breit gestreuten Brennstoffpartikel ist davon auszugehen, dass sowohl Verdunstungs- als auch Siedeprozesse für die Trocknung des Energieträgers bedeutsam sind. Aus diesem Grund wurde neben einem energetischen Ansatz auch ein Gleichgewichtsmodell implementiert.

Das Gleichgewichtsmodell berücksichtigt Trocknungsvorgänge unterhalb der Siedetemperatur von $T_V = 373,15$ K. Mit der Annahme, dass der Wasserdampfpartialdruck dem Sättigungsdampfdruck entspricht, kann die Wasserdampfkonzentration im Porensystem des Teilchens c_{p,H_2O} mit

$$c_{p,H_2O} = \frac{p_s}{R T_p} \quad (5.40)$$

ermittelt werden [147], wobei p_s den Sättigungsdampfdruck und R die universelle Gaskonstante darstellen. Das Konzentrationsgefälle zwischen dem Partikel und der umliegenden Strömung forciert einen Transport von Wasserdampf in Richtung der Umgebung. Die Trocknungsrate wird unter der Voraussetzung berechnet, dass Stofftransportprozesse den Gesamtumsatz limitieren. Für die Trocknung der Partikeloberfläche wird davon ausgegangen, dass externer Stofftransport den Vorgang kontrolliert. Für diesen Fall gilt der Ausdruck [151]

$$\dot{r}_{H_2O} = \beta_{H_2O} a_p (c_{f,H_2O} - c_{p,H_2O}) M_{H_2O} . \quad (5.41)$$

Hier sind β_{H_2O} der Stoffübergangskoeffizient des Wasserdampfs und c_{f,H_2O} die Dampfkonzentration in der umliegenden Gasphase. Während die Trocknung der Teilchenoberfläche auf der Grundlage von Stoffübergang berechnet wird, so wird in Bezug auf fortgeschrittene Verdunstungsprozesse im Inneren des Teilchens eine Begrenzung durch intrapartikuläre Diffusionsprozesse vorausgesetzt.

Bei einer Partikeltemperatur gleich bzw. oberhalb der Grenztemperatur erfolgt die Behandlung der Trocknungsvorgänge auf der Basis eines energetischen Modells. Die gesamte dem Prozess zugeführte Energie wird für die Trocknung des Brennstoffs aufgebraucht. Laut Peters [146] kann die Trocknungsrate dann mit

$$\dot{r}_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{\rho_p c_{p,p} (T_p - T_V)}{\Delta h_V \delta t_p} \quad (5.42)$$

berechnet werden. Hier sind Δh_V und δt_p die Verdampfungsenthalpie des Wassers sowie der Partikelzeitschritt.

In Bezug auf das gewählte Trocknungsmodell sind verschiedene Vereinfachungen zu erwähnen. Einerseits werden Rekondensationsprozesse strikt vernachlässigt. Untersuchungen von Haberle et al. [144] deuten darauf hin, dass die Berücksichtigung dieser Phänomene zu keiner signifikanten Steigerung der Rechengenauigkeit beiträgt. Weiterhin wird die Schrumpfung des Partikels während des Trocknungsvorgangs nicht betrachtet, da diese im Vergleich zur Schrumpfung durch Pyrolyse und Ausbrand kaum ins Gewicht fällt [89]. Eine Differenzierung nach freiem und gebundenem Wasser erfolgt ebenfalls nicht.

5.2.5 Pyrolysemodell

Hinsichtlich der Modellierung der pyrolytischen Zersetzung fester Bioenergieträger sind verschiedene Sachverhalte zu berücksichtigen. Wie bereits in Kapitel 2.2.2 ausgeführt wurde, resultiert die Pyrolyse in der Bildung sehr unterschiedlicher Produkte. Außerdem kommt es im Zuge der Konversion zu einer gravierenden Massenabnahme des Brennstoffteilchens. Das Umsatzverhalten der Biopolymere unterscheidet sich deutlich voneinander und die Konversionsrate des Gesamtvorgangs weist eine direkte Abhängigkeit zu den vorliegenden Prozessbedingungen auf.

Während des Pyrolyseprozesses zersetzen sich die Makromoleküle der Biomasse unter Bildung diverser Produkte. Zur Vereinfachung der Modellbildung werden diese meist zu drei Produktklassen zusammengefasst: leichte Gase, Teere/Öle und Koks [153]. Gängige Pyrolysemodelle basieren auf reaktionskinetischen Ansätzen und betrachten den Energieträger entweder als Einkomponenten-Brennstoff [145, 154] oder als Mehrkomponentenbrennstoff bestehend aus den Pseudo-Hauptkomponenten der Biomasse: Cellulose, Hemicellulose und Lignin [155, 156]. Ebenso existieren detail-

lierte Reaktionsschemata zur Modellierung der Biomassepyrolyse, siehe [157, 158]. Letztere sind jedoch aufgrund des signifikant höheren Rechenaufwandes nicht im Kontext großskaliger Biomassefeuerungen nutzbar. Die Verwendung von Ein- und Mehrkomponentenmodellen ist daher eine übliche Prozedur. Hinsichtlich Umsatzrate sowie Konversionszeit führt die Nutzung von Einkomponentenmodellen jedoch zu größeren Abweichungen [156, 159]. In dieser Arbeit wird deshalb ein Mehrkomponentenmodell genutzt.

In dem von Miller und Bellan [155] publizierten Verfahren durchlaufen Cellulose, Hemicellulose und Lignin im Rahmen der Primärpyrolyse zunächst eine Aktivierungs- bzw. Depolymerisationsreaktion. Anschließend wird das aktivierte Material durch zwei konkurrierende Reaktionen zu Gas und Koks sowie Teer abgebaut. Überdies berücksichtigt das Konzept die Sekundärpyrolyse von Teer zu leichten Gasen. Das Reaktionsschema einer Biomassekomponente ist in Abbildung 5.3 illustriert.

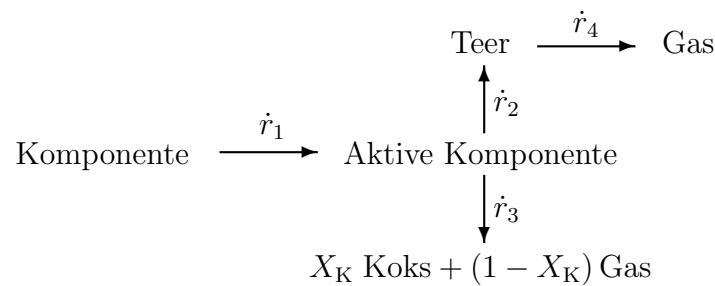


Abb. 5.3: Reaktionsschema für Primär- und Sekundärpyrolyse nach [155] S. 109

Die Umsatzrate einer Holzkomponente ergibt sich am Beispiel von Cellulose mit

$$\dot{r}_C = -k_{C,1} \rho_C . \quad (5.43)$$

Für die weitere Zersetzung des aktivierten Materials kann die Umwandlungsrate hingegen wie folgt formuliert werden

$$\dot{r}_{C,a} = k_{C,1} \rho_C - (k_{C,2} + k_{C,3}) \rho_{C,a} . \quad (5.44)$$

In den obigen Gleichungen 5.43 und 5.44 sind ρ_C und $\rho_{C,a}$ die Dichten von Cellulose und dessen aktivierten Materials. Die Größen $k_{C,1}$, $k_{C,2}$ und $k_{C,3}$ bezeichnen die Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizienten der Umwandlungsprozesse und werden mit Hilfe eines Arrhenius-Ansatzes ermittelt. Die Arbeit von Miller und Bellan liefert

in diesem Zusammenhang einen vollständigen Satz der benötigten Kinetikparameter, welche in Tabelle 5.2 zusammengetragen sind.

Tab. 5.2: Modellparameter für Primär- und Sekundärpyrolyse [155]

Reaktion	A [s^{-1}]	E_a [$10^8 J kmol^{-1}$]	Δh_R [$J kg^{-1}$]	X_{Koks} [–]
$\dot{r}_{C,1}$	$2,80 \cdot 10^{19}$	2,424	0	
$\dot{r}_{C,2}$	$3,28 \cdot 10^{14}$	1,965	-255.000	
$\dot{r}_{C,3}$	$1,30 \cdot 10^{10}$	1,505	+20.000	0,35
$\dot{r}_{H,1}$	$2,10 \cdot 10^{16}$	1,867	0	
$\dot{r}_{H,2}$	$8,75 \cdot 10^{15}$	2,024	-255.000	
$\dot{r}_{H,3}$	$2,60 \cdot 10^{11}$	1,457	+20.000	0,60
$\dot{r}_{L,1}$	$9,60 \cdot 10^8$	1,076	0	
$\dot{r}_{L,2}$	$1,50 \cdot 10^9$	1,438	-255.000	
$\dot{r}_{L,3}$	$7,70 \cdot 10^6$	1,114	+20.000	0,75
\dot{r}_4	$4,28 \cdot 10^6$	1,080	+42.000	

Im Rahmen dieser Arbeit wurden dem Modell zwei grundsätzliche Modifikationen beigelegt. Einerseits offenbarte sich bei der in Abschnitt 6.2 vorgestellten Simulation eines Festbettes, dass das Modell unter typischen Primärlufttemperaturen zu schleppend agiert. Dies ist primär auf eine zu langsame Zersetzung der Hemicellulose zurückzuführen und äußerte sich im betreffenden Fall mit einem Ausbleiben der im Brennstoffbett stattfindenden Selbstzündung. Um diesem Modellverhalten entgegen zu wirken, wurden die Kinetikparameter der Hemicellulose nachträglich adaptiert, siehe Anhang A-1. Des Weiteren wurde das Pyrolysemodell in Analogie zum Trocknungsmodell um eine durch Stofftransport limitierte Umwandlungsrate erweitert, sodass sich die Massenabnahme der pyrolysierenden Teilchen aus dem Minimum von chemischer Kinetik und Stofftransport ergibt. Insbesondere bei hohen Temperaturen und einer geringen Ausprägung thermischer Gradienten kann die Verwendung einer reinen Kinetik zu einer gesteigerten Massenabnahme der Teilchen führen, was durch das applizierte Modell weitgehend vermieden wird.

Wie in Kapitel 2.2.2 erläutert, bestehen die freigesetzten Pyrolysegase hauptsächlich aus Kohlenmonoxid, Kohlendioxid, Wasserstoff und Wasserdampf sowie leichten Kohlenwasserstoffen. Letztere setzen sich überwiegend aus Methan und Ethen zusammen [160]. Für die Behandlung der Gase im Rahmen der Pyrolysemodellierung

ist es üblich von einer festen Fluchtigenkomposition auszugehen, wobei die leichten Kohlenwasserstoffe häufig durch Methan repräsentiert werden [149,152]. Für die vorliegende Arbeit wurde ebenfalls ein solches Vorgehen gewählt. Jedoch findet eine differenzierte Betrachtung von Primär- und Sekundärpyrolysegasen entsprechend der Kompositionen in Tabelle 5.3 statt. Der im Zuge der Pyrolyse außerdem entweichende Teer wird als virtuelle Gaskomponente betrachtet, welche durch sekundäre Zersetzung und Verbrennungsprozesse abgebaut werden kann. Kondensationsprozesse werden nicht berücksichtigt.

Tab. 5.3: Massenanteile verschiedener Spezies innerhalb der Pyrolysegase [-]

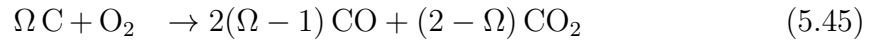
	CO	CO ₂	CH ₄	H ₂	H ₂ O	Quelle
Primärpyrolyse	0,270	0,386	0,056	0,032	0,256	[149]
Sekundärpyrolyse	0,602	0,121	0,137	-	0,140	[161]

In der Literatur herrscht weitestgehend Einigkeit darüber, dass Holzteilchen im Zuge der Verbrennung einer Größenreduktion unterliegen. Während einige Autoren diese Schrumpfungsprozesse lediglich dem Ausbrand des Restkokes zuweisen [149], so existieren ebenfalls Untersuchungen, die eine signifikante Schrumpfung des Holzes während der Pyrolyse belegen [162]. Diese Unterschiede sind vor allem auf die unterschiedlichen Rohstoffe sowie Prozessbedingungen zurückzuführen. Für eine möglichst breite Anwendbarkeit des hier entwickelten Modells können Schrumpfungsprozesse während der Pyrolyse berücksichtigt oder vernachlässigt werden. Ihre Vernachlässigung resultiert in einer Erhöhung der Teilchenporosität und Senkung der Dichte. Die Schrumpfung wird hingegen auf der Basis der errechneten Massenabnahme und der Voraussetzung konstanter Materialdichten und -porositäten erreicht.

5.2.6 Modellierung heterogener Restkoksreaktionen

Die Teilprozesse der heterogenen Restkoksreaktionen wurden bereits in Kapitel 2.2.3 ausführlich erläutert. Dort wurde festgehalten, dass sich der Abbau des Restkokes als Zusammenspiel aus Stofftransport und chemischen Reaktionen auf der Koksfläche ergibt. Der Gesamtprozess kann entweder stofftransportlimitiert oder mikrokinetisch kontrolliert sein. Üblicherweise dominiert die Reaktion mit O₂ den

Umwandlungsprozess. Unter Abschluss von Sauerstoff können außerdem die Vergasungsreaktionen mit H_2O und CO_2 für technische Anwendungen von Bedeutung sein. Innerhalb der Berechnung werden daher die Brutto-Reaktionen in den Gleichungen 5.45 bis 5.47 betrachtet.



Bei der Verbrennungsreaktion 5.45 entstehen als Produkte sowohl CO als auch CO_2 , da Kohlenmonoxid teilweise in direkte Nähe zur Koksoberfläche umgewandelt wird. Die Reaktionsenthalpie dieses Vorgangs wird üblicherweise dem Koksbrand zugeschrieben. Somit beeinflusst die Produktverteilung maßgeblich die Energiefreisetzung der Verbrennungsreaktion. Das temperaturabhängige CO/ CO_2 -Molenverhältnis kann durch unterschiedliche Ansätze berechnet werden, siehe [89]. Für die Modellierung von Biomasseverbrennung hat sich die Korrelation von Evans und Emmons [163] etabliert.

$$\text{CO}/\text{CO}_2 = 4,3 e^{(-3390 \text{ K}/T_p)} \quad (5.48)$$

Sie wurde bereits durch verschiedene Autoren genutzt [83, 89, 102] und findet auch in der vorliegenden Arbeit Verwendung. Unter Zuhilfenahme des Molenverhältnisses kann der in Gleichung 5.45 enthaltene Stöchiometriefaktor Ω mit

$$\Omega = \frac{2(1 + 4,3 e^{(-3390 \text{ K}/T_p)})}{2 + 4,3 e^{(-3390 \text{ K}/T_p)}} \quad (5.49)$$

berechnet werden [102]. Der Gesamtumsatz der Koksreaktionen ergibt sich als Summe der Umsätze der in Gleichung 5.45 bis 5.47 aufgeführten Reaktionen. Er wird basierend auf dem von Mehrabian et al. [89] publizierten Verfahren mit

$$\dot{r}_K = -\frac{1}{V_P} \sum_{i=1}^3 \frac{\Omega_i M_K}{\frac{1}{k_{K,i} A_K} + \frac{1}{\beta_i A_P} + \frac{1}{D_{\text{eff},i}} \int \frac{dr}{A(r)}} c_{f,i} \quad (5.50)$$

bestimmt. Hierbei ergibt sich die Reaktionsrate durch die Betrachtung von Einzelwiderständen für chemische Kinetik (1. Term), konvektiven Stofftransport (2. Term) sowie intrapartikuläre Diffusion durch die den Koks umgebende Asche (3. Term). Dabei steht $c_{f,i}$ für die Konzentration der gasförmigen Edukte in der Umgebung des Teilchens. A_K ist die Restkoksoberfläche und M_K die molare Masse des Rückstands. Der Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizient $k_{K,i}$ wird mit einem erweiterten Arrhenius-Ansatz und den Kinetikparametern in Tabelle 5.4 ermittelt.

Tab. 5.4: Kinetikparameter der heterogenen Koksreaktionen

Reaktion	A [m s^{-1}]	β_T [–]	T_a [K]	Quelle	Δh_R [10^3 J kg^{-1}]
5.45	1,715	1,0	9.000	[102]	variiert mit Ω
5.46	3,420	1,0	15.600	[102]	-14.357
5.47	3,420	1,0	15.600	[102]	-10.947

5.3 Gasphase

5.3.1 Bilanzgleichungen der Gasphase

Die Berechnung der kontinuierlichen Gasphase unterliegt Bilanzgleichungen für Masse, Impuls, Energie sowie insgesamt 8 Spezies (H_2O , O_2 , H_2 , CO , CO_2 , CH_4 , Teer und N_2). Innerhalb des hybriden DDPM erfolgt die Behandlung der Gleichungen ähnlich zur Zwei-Fluid-Methode (Euler-Euler-Verfahren). Für den Fall einer einzelnen kontinuierlichen Phase, wie hier betrachtet, ergeben sich die Bilanzgleichungen für Masse (5.51) und Impuls (5.52) gemäß [123] mit

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \vec{v}_f) = \dot{m}_p, \quad (5.51)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f \vec{v}_f) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \vec{v}_f \vec{v}_f) = -\alpha_f \nabla p + \nabla \cdot \bar{\vec{\tau}}_f + \alpha_f \rho_f \vec{g} + \vec{F}_p + \vec{F}_{pm}. \quad (5.52)$$

Hierbei bezeichnen α_f , p , \dot{m}_p und \vec{F}_p den Volumenanteil der kontinuierlichen Phase, den Druck sowie Quellterme, welche die Interaktionen zwischen den Phasen in Form von Massen- und Impulstransfer repräsentieren. Die Dichte des Fluides ρ_f wird mittels des in ANSYS Fluent enthaltenen Idealgasgesetzes für inkompressible Strömung

berechnet. Der Volumenanteil des Gases ergibt sich als Differenz zwischen Gesamtvolumen und dem durch das Partikeltracking erhaltenen Volumen der festen Phase. Der Spannungstensor $\bar{\bar{\tau}}$ in Gl. 5.52 ist weiterhin wie folgt definiert [123]

$$\bar{\bar{\tau}} = \alpha_f \mu_f \left(\nabla \vec{v}_f + \nabla \vec{v}_f^T \right). \quad (5.53)$$

Die Impulsbilanz (Gl. 5.52) enthält mit \vec{F}_{pm} einen weiteren Quellterm, der den Druckverlust in denen als poröse Medien betrachteten Rohrbündelwärmeübertragern des Kessels berücksichtigt, siehe Anhang A-4. \vec{F}_{pm} tritt demnach lediglich für die Simulationen der großtechnischen Anlage in Erscheinung. Für die Validierungsrechnungen in Kapitel 6 spielt er keine Rolle.

Wie eingangs erwähnt, werden insgesamt acht Gasspezies innerhalb der Simulationen betrachtet. Die Bilanz einer Gaskomponente i liest sich

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha_f \rho_f w_{f,i} \right) + \nabla \cdot \left(\alpha_f \rho_f \vec{v}_f w_{f,i} \right) = - \alpha_f \left(\nabla \cdot \vec{J}_i \right) + \alpha_f \sum_{n=1}^{n_{\text{GR}}} \dot{r}_{n,i} + \dot{m}_{p,i}, \quad (5.54)$$

wobei $w_{f,i}$ den Massenanteil der Gaskomponente, \vec{J}_i den Diffusionsstrom sowie $\dot{r}_{n,i}$ die Umwandlungsrate einer Spezies aufgrund eines chemischen Prozesses bezeichnen. In Analogie zu den Bilanzgleichungen für Masse und Impuls (Gl. 5.51 und Gl. 5.52) enthält die Speziesbilanz einen Quellterm zur Berücksichtigung der Phaseninteraktion. Verbrauch bzw. Freisetzung einer Gaskomponente innerhalb der ein Partikel umgebenden Gasphase aufgrund thermochemischer Prozesse am Brennstoffteilchen sind mit $\dot{m}_{p,i}$ bezeichnet. Der in Gleichung 5.54 vorzufindende Diffusionsstrom wird für turbulente Strömungen mit

$$\vec{J}_i = - \left(\rho_f D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla w_{f,i} \quad (5.55)$$

ermittelt [123]. Hier repräsentieren μ_t und Sc_t die turbulente Viskosität sowie turbulente Schmidt-Zahl.

Unter Voraussetzung inkompressibler Strömung und auf der Grundlage der Enthalpie h_f , definiert mit

$$h_f = \sum_{i=1}^{n_{\text{GS}}} w_{f,i} h_{f,i} \quad \text{sowie} \quad h_{f,i} = \int_{T_{\text{Ref}}}^{T_f} c_{p,i} dT_f, \quad (5.56)$$

kann die Energiebilanz der kontinuierlichen Gasphase wie in Gleichung 5.57 dargestellt werden.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f h_f) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \vec{v}_f h_f) = \nabla \cdot \left(\alpha_f \lambda_{f,\text{eff}} \nabla T_f - \sum_{i=1}^{n_{\text{GS}}} \alpha_f h_{f,i} \vec{j}_i \right) \\ + \alpha_f \sum_{n=1}^{n_{\text{GR}}} \dot{r}_n \Delta h_R + \dot{q}_{f,\varepsilon} + \dot{q}_p + \dot{h}_p + \dot{q}_{\text{pm}} \quad (5.57) \end{aligned}$$

Demnach ergibt sich die zeitliche Änderung der Enthalpie aufgrund von konvektivem Energietransport, durch Wärmeleitung, Speziesdiffusion, homogene Gasphasenreaktionen sowie Interaktion mit dem Strahlungsfeld ($\dot{q}_{f,\varepsilon}$) und der Partikelphase. Hierbei repräsentieren (\dot{q}_p) und (\dot{h}_p) den Wärme- sowie Enthalpietransport zwischen den Phasen. Ferner besitzt die Energiebilanz analog der Impulsbilanz einen Quellterm zur Berücksichtigung von Rohrbündelwärmübertragern in der großtechnischen Verbrennungsanlage (\dot{q}_{pm}). Nähere Informationen hierzu sind in Abschnitt A-4 des Anhangs vorzufinden.

5.3.2 Turbulenzmodellierung

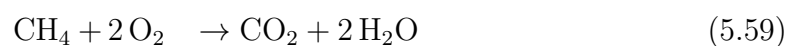
Obwohl sich in den vergangenen Jahren bereits einige Arbeiten mit skalenauflösenden Verfahren zur Simulation turbulenter Strömungen in thermochemischen Konversionsanlagen beschäftigten [98, 99], so ist die Approximation turbulenter Strukturen auf der Grundlage von Reynoldsmittelung noch immer das etablierte Vorgehen. Üblich in diesem Zusammenhang ist der Gebrauch von Zweigleichungsmodellen, wie dem Standard k - ε -Modell [55, 97], dem RNG k - ε -Modell [64], dem Realizable k - ε -Modell [58, 60, 89, 96, 164] und dem SST k - ω -Modell [87, 88].

Stationäre Reynoldsgemittelte Navier-Stokes-Gleichungen in Verbindung mit dem SST k - ω -Modell bilden die Basis zur Behandlung turbulenter Strömungen in der vorliegenden Arbeit. Die Wahl des Turbulenzmodells begründet sich dadurch, dass sowohl eine hinreichend genaue Beschreibung der Turbulenz innerhalb der freien Strömung gefordert ist, als auch eine Auflösung wandnaher Phänomene. Das SST k - ω -Modell agiert in beiden Regionen zuverlässig. Zudem liefert das Modell in Nahwandregionen physikalisch richtige Ergebnisse mit einiger Flexibilität hinsichtlich der Positionierung der ersten Gitterzelle innerhalb der Grenzschicht. Dies ist eine wesentliche Eigenschaft, um der komplizierten Geometrie sowie den kom-

plexen Strömungsstrukturen in einer großtechnischen Rostfeuerung Rechnung zu tragen. Abschließend ist hierzu anzumerken, dass das Modell zur Behandlung der Mehrphasenturbulenz innerhalb des DDPM in der „per-phase“-Formulierung angewendet wird [123]. Für weiterführende Erläuterungen zum SST k - ω -Modell sei auf die Arbeit von Menter [165] verwiesen.

5.3.3 Homogene Gasphasenreaktionen

Zusätzlich zu den thermochemischen Umwandlungsprozessen am Brennstoffteilchen kommt es in der umliegenden Gasphase zu chemischen Reaktionen. Hierzu zählt einerseits die in Abschnitt 5.2.5 aufgeführte Sekundärpyrolyse. Andererseits spielt die Verbrennung von Teeren und leichten Gasspezies, freigesetzt durch Pyrolyse und Koksausbrand, eine zentrale Rolle. Aus Gründen des Berechnungsaufwandes ist die Behandlung der Gasphasenverbrennung durch den Gebrauch eines vereinfachten Methanmechanismus ein übliches Vorgehen. Hierbei wird die Verbrennung der Gasspezies durch einige wenige Bruttoreaktionen dargestellt, siehe [58, 84, 99]. Innerhalb dieser Arbeit wird die Verbrennung von CO, CH₄ und H₂ entsprechend der nachfolgenden Reaktionen 5.58-5.60 betrachtet.



Darüber hinaus wird die Verbrennung gebildeter Pyrolyseöle nach Gleichung 5.61 behandelt [83]. Die Berechnung sämtlicher Reaktionsraten basiert auf dem im ANSYS Fluent enthaltenen Finite-Rate/Eddy-Dissipation-Model [123]. Jenes beruht auf dem Sachverhalt, dass der langsamere Prozess aus turbulenter Durchmischung sowie chemischer Kinetik die Umwandlung limitiert. Die Berechnung der kinetischen Verbrennungsraten erfolgt durch einen Arrhenius-Ansatz, wie in den Gleichungen 5.62-5.65 dargestellt [72, 166, 167].

$$\dot{r}_{\text{Kin,CO}} = M_{\text{CO}} A e^{\frac{-E_a}{RT_f}} c_{\text{f,CO}}^{1,0} c_{\text{f,O}_2}^{0,25} c_{\text{f,H}_2\text{O}}^{0,5} \quad (5.62)$$

$$\dot{r}_{\text{Kin,CH}_4} = M_{\text{CH}_4} A e^{\frac{-E_a}{RT_f}} c_{\text{f,CH}_4}^{0,7} c_{\text{f,O}_2}^{0,8} \quad (5.63)$$

$$\dot{r}_{\text{Kin,H}_2} = M_{\text{H}_2} A e^{\frac{-E_a}{RT_f}} c_{\text{f,H}_2}^{1,0} c_{\text{f,O}_2}^{1,0} \quad (5.64)$$

$$\dot{r}_{\text{Kin,Teer}} = M_{\text{Teer}} A T_f e^{\frac{-E_a}{RT_f}} c_{\text{f,Teer}}^{0,5} c_{\text{f,O}_2}^{1,0} \quad (5.65)$$

Die entsprechenden Vorfaktoren sowie Aktivierungsenergien der Verbrennungsreaktionen sind in der nachfolgenden Tabelle 5.5 zusammengefasst.

Tab. 5.5: Kinetikparameter für homogene Gasphasenreaktionen

Reaktion	A	E_a [10^8 J kmol^{-1}]	Quelle
5.62	$2,239 \cdot 10^{12}$	1,702	[72]
5.63	$1,585 \cdot 10^{13}$	2,025	[166]
5.64	$9,870 \cdot 10^8$	0,310	[72]
5.65	$9,200 \cdot 10^6$	0,802	[167]

Die Rate turbulenzinduzierter Mischungsvorgänge wird für sämtliche Reaktionen mit Hilfe des von Magnussen und Hjertager [168] vorgeschlagenen Verfahrens nach Gleichung 5.66 ermittelt.

$$\dot{r}_{Turb} = \min \left(A_{\text{Mag}} \rho_f \frac{\epsilon_t}{k_t} w_{\text{Bs}}, A_{\text{Mag}} \rho_f \frac{\epsilon_t}{k_t} \frac{w_{\text{Ox}}}{l_{\text{Bs}}}, A_{\text{Mag}} B_{\text{Mag}} \rho_f \frac{\epsilon_t}{k_t} \frac{w_{\text{Pro}}}{1 + l_{\text{Bs}}} \right) \quad (5.66)$$

Hierbei sind w_{Bs} , w_{Ox} und w_{Pro} die Massenanteile von Brennstoff, Oxidator und entsprechend der Reaktionsgleichungen 5.58 bis 5.60 gebildeter Produkte. l_{Bs} ist der auf 1 kg Brennstoff bezogene Bedarf an Oxidationsmittel und k_t sowie ϵ_t repräsentieren die turbulente kinetische Energie sowie Dissipationsrate. A_{Mag} und B_{Mag} sind Modellkonstanten, die ursprünglich mit einem Wert von 4, respektive 0,5 versehen sind. Zumeist sind die errechneten Reaktionsraten auf der Grundlage der vorgegebenen Parameter zu intensiv, sodass eine Anpassung der Modellkonstanten erforderlich ist. Typischerweise wird A_{Mag} für technische Feuerungen auf Werte zwischen 0,5 und 1,0 reduziert, während B_{Mag} unverändert bleibt [56]. Die Wahl der Parameter spielt insbesondere in Bezug auf Emissionsberechnungen eine Rolle. So empfehlen Scharler et al. [164] zur Bestimmung des Kohlenmonoxidausstoßes für A_{Mag} einen Wertebe-

reich von 0,6-1,0. Als Kompromiss zwischen einer möglichst intensiven Verbrennung und einer drastischen Überbestimmung des Abbrandes, wird für die Simulation der industriellen Rostfeuerung in Kapitel 7 für die Modellkonstante A_{Mag} ein Wert von 1,0 zugrunde gelegt. Für B_{Mag} wird hingegen der ursprüngliche Wert beibehalten.

5.4 Wärmestrahlung

Bewegt sich Strahlung durch ein strahlungsaktives Medium, so ergibt sich entlang der Ausbreitungsrichtung aufgrund von Emission, Absorption und Streuung eine Änderung der Strahlungsintensität. Dies kann allgemein durch die Strahlungstransfergleichung ausgedrückt werden. Transportiert ein strahlungsaktives Gas, wie in Verbrennungssystemen üblich, zusätzlich eine emittierende, absorbierende und streuende Partikelfracht, so nimmt auch diese Einfluss auf das Strahlungsfeld. Für derartige Fälle löst das in ANSYS Fluent enthaltene DOM unter Annahme eines grauen Strahlers für sowohl Fluid als auch Partikel die Strahlungstransfergleichung der nachfolgenden Form [123]

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (I(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s}) + (a_{\varepsilon, f} + a_{\varepsilon, p} + \sigma_{\varepsilon, p}) I(\vec{r}, \vec{s}) &= a_{\varepsilon, f} n_B^2 \frac{\sigma_B T_f^4}{\pi} + E_p \\ &+ \frac{\sigma_{\varepsilon, p}}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' . \end{aligned} \quad (5.67)$$

$I(\vec{r}, \vec{s})$ ist dabei die Strahlungsintensität mit dem Ortsvektor \vec{r} und dem Richtungsvektor \vec{s} . Der zweite Term in Gleichung 5.67 beschreibt die Reduktion der Strahlungsintensität aufgrund von Absorption sowie Streuung in anderen Raumrichtungen, wobei $a_{\varepsilon, f}$ und $a_{\varepsilon, p}$ die äquivalenten Absorptionskoeffizienten von Fluid und Partikeln repräsentieren. $\sigma_{\varepsilon, p}$ ist der äquivalente Streukoeffizienten der Partikelfracht. Streuung durch das Fluid wird vernachlässigt. Strahlungsemission durch das Fluid wird durch den ersten Term auf der rechten Seite von Gl. 5.67 behandelt. Der Term E_p bezeichnet die Strahlungsemission durch vorhandene Partikel. Der letzte Term berücksichtigt die Einbringung von Strahlung aufgrund von Streuung aus anderen Raumrichtungen. Hier sind $\Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}')$ die Phasenfunktion mit dem Richtungsvektor der Streuung \vec{s}' und Ω' der Raumwinkel. Die Phasenfunktion ist

$$\Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') = 1 + \kappa \vec{s} \cdot \vec{s}' . \quad (5.68)$$

Der Koeffizient κ besitzt den Wert null (isotrope Streuung). Die Emission von Wärmestrahlung durch vorhandene Partikel wird durch den Ausdruck

$$E_p = \lim_{V \rightarrow 0} \sum_{n=1}^{n_p} \varepsilon_{p,n} A_{p,n} \frac{\sigma_B T_{p,n}^4}{\pi V} \quad (5.69)$$

behandelt, wobei für die projizierte Fläche eines beliebigen Partikels n

$$A_{p,n} = \frac{\pi d_{p,n}^2}{4} \quad (5.70)$$

gilt. Die Strahlungsabsorption durch vorkommende Teilchen der diskreten Phase wird auf der Grundlage des äquivalenten Absorptionskoeffizienten berechnet. Jener ist als

$$a_{\varepsilon,p} = \lim_{V \rightarrow 0} \sum_{n=1}^{n_p} \varepsilon_{p,n} \frac{A_{p,n}}{V} \quad (5.71)$$

definiert. Zu guter Letzt ist der äquivalente Streufaktor mit

$$\sigma_{\varepsilon,p} = \lim_{V \rightarrow 0} \sum_{n=1}^{n_p} (1 - f_{p,n}) (1 - \varepsilon_{p,n}) \frac{A_{p,n}}{V} \quad (5.72)$$

gegeben. Der Streufaktor eines einzelnen Partikels $f_{p,n}$ wurde mit 0,6 angesetzt [169]. Die Emissionskoeffizienten sind in Tabelle 5.1 vorzufinden. Strahlungsemission und -absorption durch die Verbrennungsgase werden auf der Grundlage des Weighted-Sum-of-Gray-Gases-Model (WSGGM) [123] ermittelt.

5.5 Modellierung der Depositionsentstehung

Die Entstehung von Ablagerungen in großtechnischen Feuerungen ist primär auf die Anhaftung grober Flugasche sowie homogene und heterogene Kondensation volatiler Ascheverbindungen zurückzuführen, siehe Kapitel 3. Depositionsbildung durch Aschedampfkondensation gewinnt mit einer Abnahme der Rauchgastemperaturen zunehmend an Bedeutung und kann bezüglich der konvektiven Heizflächen entscheidend sein. Im Hochtemperaturbereich ist Aschekondensation kaum relevant.

Grundlage des hier vorgestellten Depositionsmodells sind Beobachtungen aus einer realen Referenzanlage, welche in Kapitel 7 näher vorgestellt wird. Im Rahmen einer

im April 2016 durchgeführten Revision der holzhackgutbetriebenen Rostfeuerung wurden massive Belagsstrukturen im Bereich von Haupt- und Sekundärverbrennung verzeichnet, siehe Abbildung 3.1. Betroffen waren weiterhin Bereiche der Feuerraumdecke, der Kesseldecke sowie das Durchtrittsgitter zwischen dem ersten und zweiten Rauchgaszug. Die Konvektionsheizflächen waren hingegen kaum von Belagsbildung befallen. Das Ablagerungsmodell soll eingesetzt werden, um die gravierende Depositionsbildung im Hochtemperaturbereich der Anlage zu analysieren. Aufgrund des dort vorherrschenden Temperaturniveaus ist davon auszugehen, dass anhaftende Flugasche maßgebend für den Belagsaufbau ist. Aschedampfkondensation wird in der vorliegenden Arbeit deshalb nicht betrachtet.

Wie üblich, wird die Haftungsneigung von Flugaschepartikeln durch den statistischen Ansatz von Walsh et al. [119] beschrieben.

$$p_{\text{Haft}} = p_p + p_w \cdot [1 - p_p] \quad (5.73)$$

Wird ein im Rauchgas befördertes Teilchen bis an eine Wand befördert, so entscheidet die Haftwahrscheinlichkeit p_{Haft} über Anhaftung oder Reflexion des Partikels. Diese steht in Abhängigkeit zur Haftungsneigung des Teilchens p_p sowie der Beschaffenheit der Wand bzw. Ablagerungsoberfläche p_w . Zur Bestimmung der Partikelhaftungsneigung findet, wie für Biomasseaschen typisch, ein Viskositätsansatz Gebrauch [170].

$$p_p = \min \left(\frac{\mu_{a,\text{Krit}}}{\mu_a}, 1 \right) \quad (5.74)$$

Hier ist μ_a die aktuelle Viskosität des Aschepartikels im Moment des Auspralls, welche eine Abhängigkeit zur Partikeltemperatur sowie der Aschekomposition besitzt. $\mu_{a,\text{Krit}}$ ist ein Schwellenwert, welcher die Menge der Ablagerungen kalibriert. In Abhängigkeit der Anwendung ist $\mu_{a,\text{Krit}}$ in der Literatur mit sehr unterschiedlichen Werten versehen. Die Bandbreite reicht von 8 Pa·s bis 10⁸ Pa·s [122]. Für ein möglichst realitätsnahes Modellverhalten wird der Schwellenwert in dieser Arbeit in Analogie zur tatsächlichen Viskosität des Teilchens mit Hilfe der Korrelation von Senior und Srinivasachar [171] ermittelt. Zwischen Partikelviskosität und -temperatur gilt dabei der folgende Zusammenhang

$$\log \left(\frac{\mu_a}{T_p} \right) = A_{\text{Asche}} + \frac{10^3 B_{\text{Asche}}}{T_p} \quad (5.75)$$

Die Modellparameter A_{Asche} und B_{Asche} besitzen eine Abhängigkeit zur Aschekomposition. Die Korrelationen zur Bestimmung der Modellgrößen sind im Anhang A-2 zu finden. Nach Sreedharan und Tafti [170] wird zur Bestimmung der kritischen Viskosität die Partikeltemperatur durch die Erweichungstemperatur T_S der Asche substituiert. Diese ist entweder durch Analyse des Ascheschmelzverhaltens bekannt oder wird nach Yin et al. [172] mit der Gleichung

$$T_S = 92,55 w_{\text{SiO}_2} + 97,83 w_{\text{Al}_2\text{O}_3} + 84,52 w_{\text{Fe}_2\text{O}_3} + 83,67 w_{\text{CaO}} + 81,04 w_{\text{MgO}} + 91,92 a_{\text{Asche}} - 7891 \quad (5.76)$$

angenähert. Hier sind w_{SiO_2} , $w_{\text{Al}_2\text{O}_3}$, $w_{\text{Fe}_2\text{O}_3}$, w_{CaO} und w_{MgO} die prozentualen Massenanteile relevanter Aschespezies. Gleichung 5.76 besitzt Gültigkeit für SiO_2 -Anteile von bis zu 60 %, Al_2O_3 -Anteile unter 30 % sowie Fe_2O_3 -Anteile von maximal 15 %. Für Aschen, welche die genannten Bedingungen nicht erfüllen, sind in [172] weitere Korrelationen zu finden. Der in Gleichung 5.76 vorkommende Faktor a_{Asche} ist als

$$a_{\text{Asche}} = 100 - (w_{\text{SiO}_2} + w_{\text{Al}_2\text{O}_3} + w_{\text{Fe}_2\text{O}_3} + w_{\text{CaO}} + w_{\text{MgO}}) \quad (5.77)$$

definiert. Das Verfahren zur Berechnung der Erweichungstemperatur bezieht sich ursprünglich auf Kohleasche. Um die Anwendbarkeit auf die hier betrachteten Biomasseaschen zu verifizieren, wurden Analysen zur Komposition und zum Schmelzverhalten verschiedener Ascheproben der Referenzanlage beauftragt. Die Analysen wurden am Institut für Energieverfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen der TU Bergakademie Freiberg durchgeführt. Tabelle 5.6 gibt die Zusammensetzung der Ascheprobe, die im Bereich der Sekundärverbrennung entnommen wurde und als Basis des weiteren Vorgehens dient.

Tab. 5.6: Aschekomposition der Referenzprobe wie erhalten [Ma.-%]

Na_2O	MgO	Al_2O_3	SiO_2	P_2O_5	SO_3	Cl	K_2O
0,7793	2,3690	3,4690	53,9200	2,7450	2,1680	0,0116	11,8000
CaO	TiO_2	V	Cr	Mn	Fe_2O_3	Rest	
18,6800	0,2592	0,0018	0,0080	0,5464	1,6370	1,6057	

Mit Hilfe von Gleichung 5.76 und der Aschezusammensetzung in Tabelle 5.6 ergibt sich die Erweichungstemperatur zu $T_S = 1437 \text{ K}$. Um diesen Wert zu überprüfen,

wurde neben der Aschekomposition auch das Schmelzverhalten der Probe experimentell untersucht. Grundsätzlich unterliegt die Analyse des Schmelzverhaltens der subjektiven Wahrnehmung und ist mit einiger Unsicherheit verbunden. Die in Tabelle 5.7 enthaltenen Temperaturdaten sind daher lediglich als Näherungswerte zu betrachten. Vor diesem Hintergrund ist die Abweichung zwischen errechneter und experimentell beobachteter Erweichungstemperatur als geringfügig einzustufen.

Tab. 5.7: Ascheschmelzverhalten der Referenzprobe wie erhalten

Zustand	Optische Veränderung	Erweichung	Sphärisch	Halbkugel	Fließen
Temperatur [K]	1193	1409	1448	1474	1536

Unter Vernachlässigung des Einflusses von Wand- bzw. Ablagerungsoberfläche auf den Belagsaufbau, kommt eine Anhaftung der Partikel lediglich bei Unterschreitung der kritischen Viskosität zustande. Hinsichtlich der Haftwahrscheinlichkeit resultiert so ein binäres Verhalten mit einer Unstetigkeit bei der Erweichungstemperatur $T_S = 1437$ K. Dies ist durch den gestrichelten Graphen in Abbildung 5.4 illustriert.

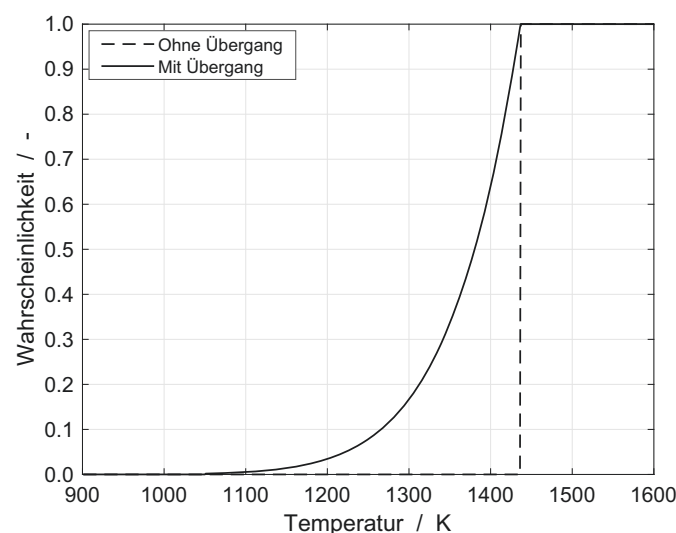


Abb. 5.4: Haftwahrscheinlichkeit eines Partikels mit/ohne Übergangsfunktion

Bei diesem Modellverhalten verhindern selbst kleinste Temperaturunterschiede eine Anhaftung aufkommender Teilchen. Um ein realistischeres Ablagerungsmodell zu generieren, wurde wie in [170] eine zusätzliche Übergangsfunktion implementiert.

Diese erlaubt den Belagsaufbau in einem festgelegten Temperaturbereich unterhalb des Schwellenwertes. Die Haftwahrscheinlichkeit eines aufkommenden Partikels unter Berücksichtigung der Übergangsfunktion ist ebenfalls in der Abbildung 5.4 veranschaulicht.

Es ist bekannt, dass die Beschaffenheit der Ablagerungsoberfläche die Fangrate aufkommender Teilchen signifikant beeinflusst. Beispielweise erhöht sich die Wahrscheinlichkeit einer Anhaftung aufkommender Partikel durch die Anwesenheit klebriger Beläge. Dies ist durch einen zusätzlichen Term in der Berechnung der Haftungsneigung in Gleichung 5.73 berücksichtigt. Unterschreitet die Viskosität der im Hochtemperaturbereich vorhandenen Beläge den Schwellenwert, so gilt $p_w = 1$ und es erhöht sich die Fangrate der nicht-haftfähigen Partikelfracht. Anderenfalls verschwindet der Einfluss der Oberfläche und p_w besitzt den Wert null. In diesem Fall ist lediglich der Zustand des Partikels entscheidend.

Hinsichtlich der Depositionsmodellierung sind abschließend zwei Bemerkungen aufzuführen. Zum einen wird ein Materialabtrag bzw. die erosive Wirkung reflektierender Teilchen strikt vernachlässigt, was mit der insgesamt sehr hohen Haftungsneigung der Flugpartikel in der später betrachteten Anlage begründet werden kann. Zum anderen kommt es durch anhaltende Erweichungsprozesse zur Beeinflussung charakteristischer Partikeleigenschaften, wie Teilchendichte und -durchmesser. Untersuchungen von Lanzerstorfer [173] belegen, dass die Dichte von Biomasseflugascheteilchen zwischen $2210 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ und $2740 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ beträgt. Dies steht im Kontrast zur verwendeten Aschedichte von $250 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ in Tabelle 5.1 und ist wohl auf eine Verminderung der Ascheporosität durch Schmelzvorgänge zurückzuführen. Um im Rahmen der Depositionsmodellierung die aufgrund von Erweichung hervorgerufene Änderung der Flugeigenschaften zu berücksichtigen, erfolgt eine temperaturabhängige Berechnung der Aschedichte. Hierbei wird die Dichte im Temperaturbereich von 1193 K (optische Veränderung Tabelle 5.7) bis 1437 K zwischen $250 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ und $2500 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ interpoliert.

5.6 Implementierung und Lösungsprozedur

Zur Lösung der kontinuierlichen Bilanzgleichungen finden der druckbasierte Algorithmus und das phasen-gekoppelte SIMPLE-Verfahren (PC-SIMPLE) von ANSYS Fluent Gebrauch [123]. PC-SIMPLE ist eine erweiterte Form des SIMPLE-Ansatzes für Mehrphasenströmungen. Bei dieser Form der Druck-Geschwindigkeits-Kopplung erfolgt die Gleichungslösung sequentiell. Nach Berechnung aller Geschwindigkeitskomponenten der Phasen wird die Druckkorrekturgleichung auf der Grundlage einer globalen Volumenerhaltung aufgestellt. Druck und Geschwindigkeiten werden nachfolgend korrigiert, um die Kontinuitätsbedingung zu erfüllen. Die Lösung von Bilanzgleichungen zusätzlicher Skalare (Spezies, Energie, etc.) erfolgt nachgeschaltet. Diese Prozedur wird für jeden Fluid-Zeitschritt ausgeführt bis die Konvergenzkriterien erreicht sind. Für die zeitliche Diskretisierung kommt ein implizites Schema erster Ordnung zum Einsatz. Das Partikeltracking basiert auf einem impliziten Euler-Verfahren und erfolgt unabhängig vom Fluidzeitschritt durch eine eigene Zeitschrittweite. Wegen der Notwendigkeit einer hinreichenden Auflösung vorkommender Kontakt Ereignisse fällt der Partikelzeitschritt im Zuge der DEM gegenüber dem Fluidzeitschritt signifikant geringer aus.

Die Bilanzgleichungen des Partikelmodells (Gl. 5.17 und Gl. 5.18) werden mittels Finite-Volumen-Methode gelöst. Jedes Partikel wird zu Beginn der Simulation durch ein äquidistantes Gitter in einzelne Kontrollvolumina zerlegt. Jede Zelle ist dabei durch eine homogene Verteilung von Zustandsgrößen charakterisiert. Die einzelnen Bilanzgleichungen werden über jedes Kontrollvolumen integriert. Unter Anwendung des Gauß'schen Integralsatzes werden die Terme der über die Systemgrenzen zu oder abfließenden Energieflüsse in Oberflächenintegrale umgeformt. Der konvektive Energietransport wird durch ein Aufwindverfahren erster Ordnung diskretisiert. Ein zentrales Differenzierungsschema zweiter Ordnung findet Anwendung für den Diffusionsterm der Energiebilanz. Für die Zeitintegration kommt der Einfachheit wegen ein explizites Euler-Verfahren zum Einsatz.

Der Ablauf innerhalb des Partikelmodells folgt bei jedem Aufruf durch den Strömungslöser dem in Abbildung 5.5 illustrierten Schema. Nach der Datenübergabe aus der kontinuierlichen Fluidberechnung sowie der Erfassung aktueller Partikelinformationen erfolgt die Bestimmung thermophysikalischer Eigenschaften sämtlicher Zellen auf Basis der vorherrschenden Temperatur und Komposition. Anschließend

wird die Berechnung von Stoff-, Enthalpie- und Wärmetransport sowie der Umsatzraten von Trocknung, Pyrolyse und Koksreaktionen vorgenommen. Daran anknüpfend werden die Bilanzgleichungen gelöst und das Temperaturfeld sowie die Speziesverteilung innerhalb eines Partikels aktualisiert. Unter Annahme konstanter Materialdichten wird die Ausdehnung einer Zelle erneut berechnet und das Partikelgitter erfährt ein Update. Schlussendlich werden die gewonnenen Daten für die nächsten Rechenschritte hinterlegt und globale Quellterme für die Kommunikation mit ANSYS Fluent erstellt.

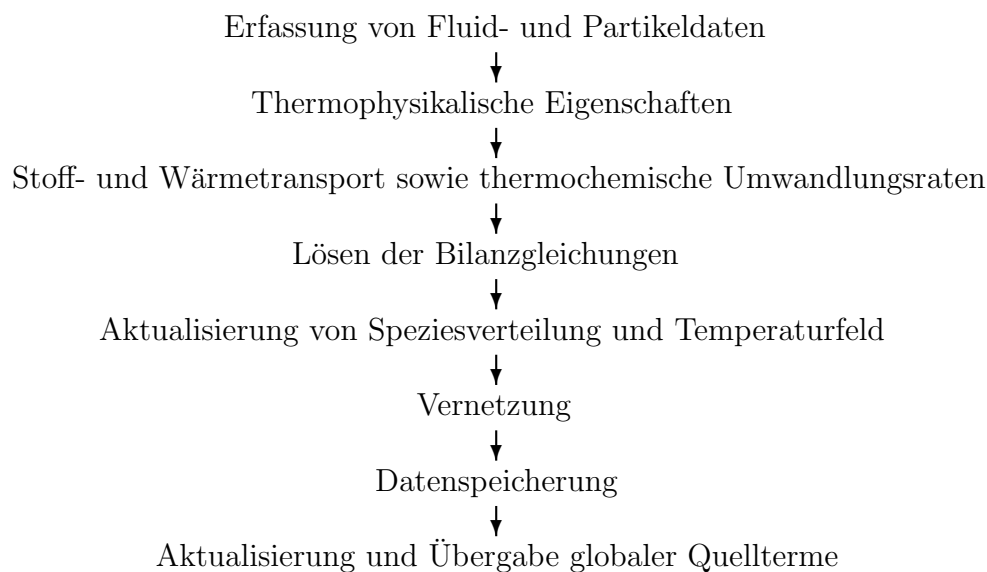


Abb. 5.5: Berechnungsablauf innerhalb des Partikelmodells

Die Einbindung des Modells erfolgt durch eigene Programmsequenzen (UDFs). Die in der Programmiersprache C formulierten Funktionen ermöglichen die Manipulation bestehender sowie Integration eigener Modelle mit Hilfe vordefinierter Schnittstellen. Basis für die Implementierung des 1D-Partikelmodells ist die Mehrkomponenten-Formulierung des DPM/DDPM und damit zur Verfügung stehende Makros, siehe Tabelle A-3 des Anhangs.

5.7 Fazit

Auf den vorangegangenen Seiten des Kapitels 5 wurde die in der vorliegenden Arbeit entwickelte CFD-DEM-Methode ausführlich beschrieben. Das Verfahren basiert auf dem in ANSYS Fluent enthaltenen DDPM. Das zentrale Element des Simulationsverfahrens besteht allerdings in einem eigens entwickelten 1D-Partikelmodell, welches mit Hilfe eines reduzierten Satzes an Bilanzgleichungen eine effiziente Beschreibung der Verbrennung von Holzteilchen erlaubt und mit Hilfe diverser UDFs in den Strömungslöser eingebettet wurde. Das Partikelmodell enthält verschiedene Untermodelle zur Behandlung von Trocknung, Brennstoffpyrolyse und heterogenen Restkoksreaktionen. Neben teils reaktionskinetischen Ansätzen basiert das Verbrennungsmodell auf verschiedenen Stoff- und Wärmetransportmechanismen. So besteht eine breite Anwendbarkeit auf unterschiedlichste Teilchengrößen und Umgebungsbedingungen, was eine wesentliche Voraussetzung ist, um die Heterogenität des Energieträgers in der Simulation zu berücksichtigen. Da lediglich eine Energiebilanz und insgesamt neun Speziesbilanzen berechnet werden, ist der Berechnungsaufwand für das Modell trotz der breiten Gültigkeit vergleichsweise gering. Dieser Sachverhalt ist entscheidend, um große Partikelanhäufungen zu betrachten. In diesem Zusammenhang genauso bedeutsam ist der Gebrauch von Partikelpaketen zur Approximation der Dynamik des granularen Materials. Gegenüber konventionellen DEM-Ansätzen, bei denen Kontaktereignisse auf Partikelebene detektiert werden, bietet der Paketansatz verschiedene Vorzüge hinsichtlich des Berechnungsaufwandes. Einerseits wird die Anzahl der zu betrachtenden Teilchen erheblich gemindert, andererseits kann die Partikelzeitschrittweite auch bei Berücksichtigung sehr kleiner Teilchen vergleichsweise groß gewählt werden. Abschließend ist noch in Bezug auf das in Abschnitt 5.5 vorgestellte Ablagerungsmodell folgendes hervorzuheben. Die kritischen Viskosität wird in dieser Arbeit nicht als ein Kalibrierungsfaktor verstanden, um die Menge der gebildeten Beläge zu skalieren. Die Größe wird stattdessen durch die bekannte Erweichungstempertaur einer Ascheprobe berechnet. Dies soll in der späteren Rostfeuerung zu einem möglichst realitätsnahen Ablagerungsbild beitragen.

6 Validierung

Die Validierung des in Kapitel 5 dargestellten Verfahrens zur Simulation der Holzverbrennung erfolgt auf zwei Ebenen. Zunächst werden Trocknung, Pyrolyse und Abbrand von Brennstoffpartikeln in einem Einzelpartikelreaktor simuliert und mit experimentellen Daten aus der Literatur gegenübergestellt. Dies wird in Abschnitt 6.1 näher erläutert. Daran anknüpfend wird die Holzverbrennung in einem kleinskaligen Festbettreaktor simuliert und mit Messdaten verglichen, um die gesamtheitliche Funktionsweise des CFD-DEM-Konzeptes zu verifizieren. Die Berechnung des Festbettreaktors wird in Abschnitt 6.2 thematisiert.

6.1 Konversion eines einzelnen Holzteilchens

Lu et al. [107,108] analysierten die thermochemische Konversion von Brennstoffteilchen aus Pappelholz unter sowohl inerte als auch oxidative Atmosphäre mittels numerischer Simulation und Experiment in einem Einzelpartikelreaktor. Die Autoren betrachteten die Pyrolyse und Verbrennung von Pappelteilchen unterschiedlicher Form und Größe sowie Wasseranteile. Während der experimentellen Versuche wurde neben Oberflächen- und Kerntemperatur auch die Massenabnahme der Brennstoffpartikel erfasst. Die dabei generierten Daten wurden bereits mehrfach durch andere Autoren für die Validierung neuer Modelle verwendet [74,89,105,144,148,174]. Auch in der vorliegenden Arbeit erfolgt die simulative Nachbildung der Einzelpartikelversuche, um die Funktionsweise des Partikelmodells zu verifizieren.

Der innere Durchmesser des Einzelpartikelreaktors beträgt 0,15 m und seine Höhe beläuft sich auf 0,5 m [89]. Innerhalb des Systems wird ein Brennstoffteilchen mit vorgewärmter Luft bzw. Stickstoff (1050 K) beaufschlagt. Am Boden des Reaktors installierte Heizelemente erwärmen die Reaktorwände sowie die Brennstoffprobe zusätzlich. Dabei erreichen die Brennkammerwandungen im Bereich des Holzpartikels eine mittlere Temperatur von ca. 1276 K. Oberflächen- und Zentrumstemperatur der Holzteilchen werden mit Hilfe von Thermoelementen (Typ B oder K) mit 20 Hz erfasst. Der Datenlogger, die daran installierten Thermoelemente und das Biomaseteilchen sind auf einer Waage platziert, welche die Massenabnahme des Partikels

mit einer Auflösung von 0,1 mg detektiert. Ein Schema des Einzelpartikelreaktors und des applizierten Messaufbaus ist in Abbildung 6.1 illustriert.

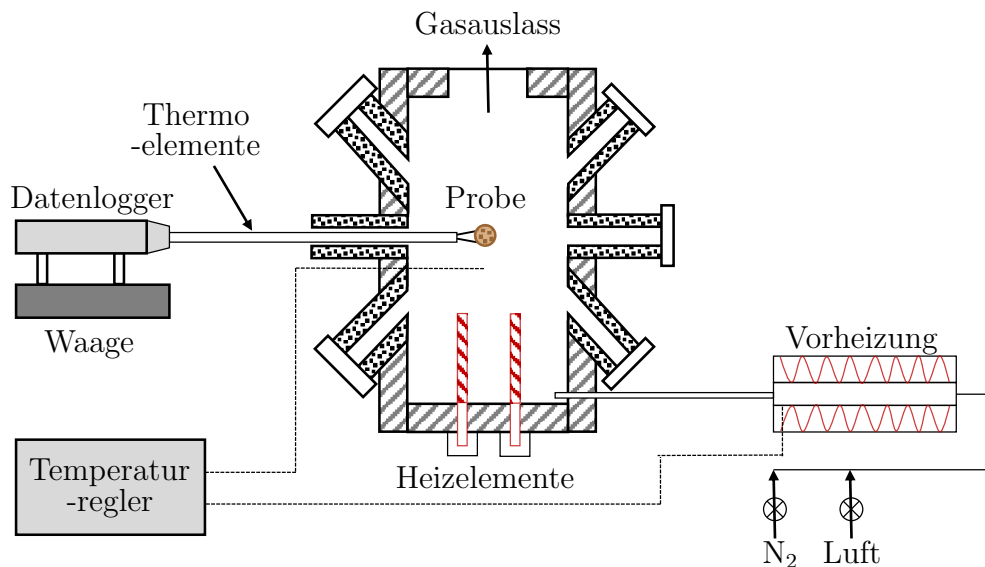


Abb. 6.1: Schematische Darstellung von Messaufbau und Einzelpartikelreaktor zur Analyse des Verhaltens von Pappelteilchen während der thermochemischen Umwandlung [107]

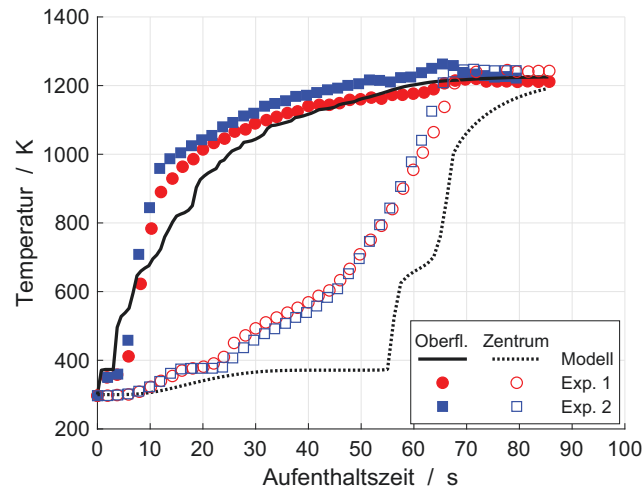
Hinsichtlich der durchgeführten Validierungsrechnungen am einzelnen Holzpartikel ist Folgendes aufzuführen. Da lediglich ein einzelnes Brennstoffteilchen betrachtet wird, findet an Stelle des DDPM die konventionelle Formulierung des Euler-Lagrange-Ansatzes (DPM) Anwendung. Außerdem werden Schrumpfungsprozesse sowohl während der Pyrolyse als auch des Koksausbrandes berücksichtigt.

6.1.1 Pyrolyse

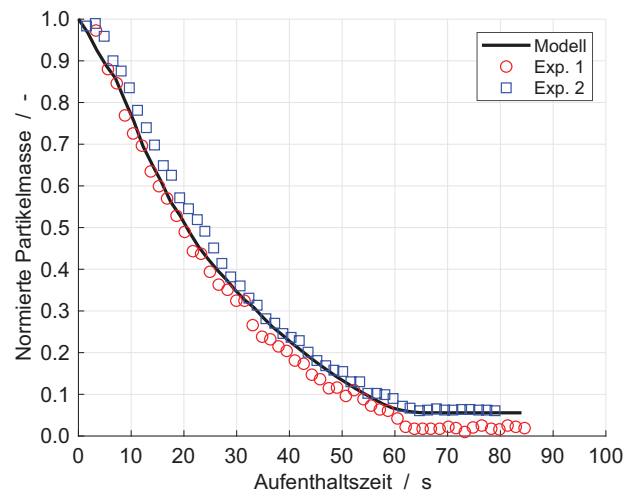
Im Rahmen der ersten Validierungsrechnungen wird die thermochemische Konversion eines Pappelpartikels unter inerten Umgebungsbedingungen betrachtet. Das im aufgewärmten Reaktor befindliche Holzteilchen durchläuft während der Umwandlung eine Aufheizphase, Trocknungs- sowie Pyrolyseprozesse.

Beim ersten Validierungsfall wird ein zylindrisches Partikel mit einem Durchmesser $d_p = 9,5 \text{ mm}$ und einer Länge $l_p = 9,5 \text{ mm}$ umgesetzt. Der Wasseranteil des Brennstoffs beträgt 40 Ma.-% bezogen auf das nasse Teilchen. In Abbildung 6.2 a sind

sowohl die gemessenen Oberflächen- und Kerntemperaturen aus zwei unabhängigen Versuchen als auch die durch das Modell errechneten Temperaturverläufe aufgetragen.



(a)



(b)

Abb. 6.2: Vergleich von Messung und Simulation für die Pyrolyse eines Pappelteilchens in Stickstoff ($d_p = 9,5$ mm, $l_p = 9,5$ mm und 40 Ma.-% Wasser); Experimentelle Daten entstammen aus [107]

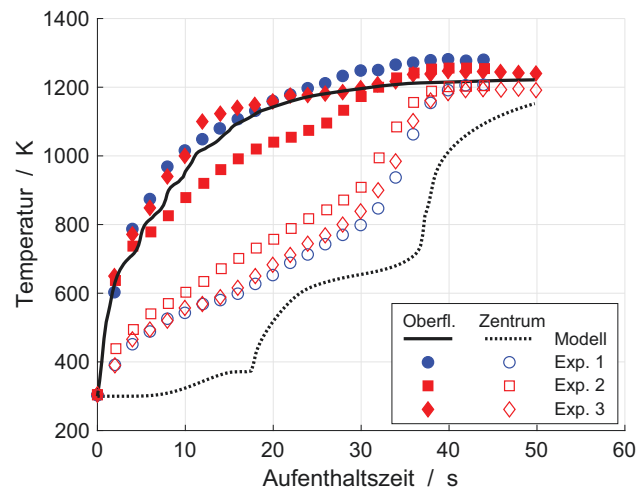
In Bezug auf die Oberflächentemperatur ist zu erkennen, dass sich nach einer kurzen Erwärmungsphase zunächst ein Plateau einstellt, da von außen zugeführte Wärme, primär in Form von Wärmestrahlung, durch die Endothermie der Trocknungspro-

zesse verbraucht wird. Sind Trocknungsvorgänge an der Oberfläche weitgehend abgeschlossen, folgt ein rascher Temperaturanstieg, der zur Einleitung der Pyrolyse führt. In Abhängigkeit intrapartikulärer Wärmeleitung schreiten Trocknung und Pyrolyse in Richtung des Partikelzentrums voran. Aufgrund der im Vergleich zur externen Wärmezufuhr langsameren Wärmeleitung im Inneren des Teilchens reagiert die Kerntemperatur des Partikels gegenüber der sich schnell aufheizenden Oberfläche verzögert. In Analogie zur Oberfläche folgt der Aufheizphase des Zentrums ein Temperaturplateau, bedingt durch die endotherme Wirkung der Trocknung. Ist das Wasser vollständig verbraucht, kommt es zum Temperaturanstieg und zur pyrolytischen Zersetzung. Nach Abschluss der thermochemischen Umwandlungsprozesse besitzen Oberfläche und Zentrum ein vergleichbares Temperaturniveau.

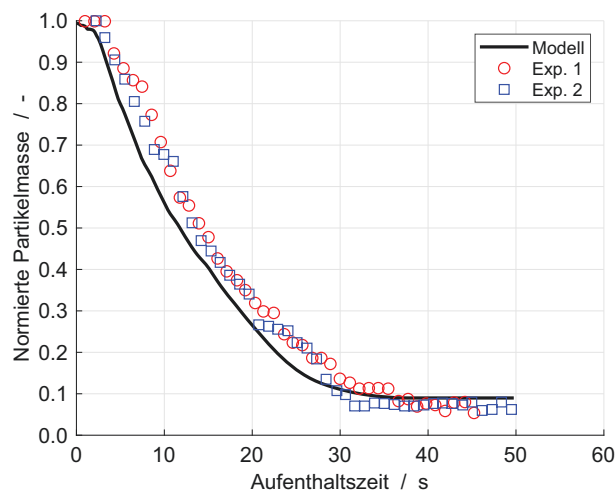
Eine Gegenüberstellung der errechneten und gemessenen Temperaturverläufe lässt eine gute qualitative sowie quantitative Übereinstimmung hinsichtlich der Oberflächentemperatur erkennen. Der Anstieg der Zentrumstemperatur erfolgt hingegen zu langsam und das Modell berechnet für den Partikelkern ein signifikant längere Trocknungsdauer. Der Verlauf der Kerntemperatur steht grundsätzlich in direktem Zusammenhang zu den thermophysikalischen Eigenschaften in Tabelle 5.1 und kann durch Wahl anderer Daten entscheidend beeinflusst werden. Eine bessere Wärmeleitfähigkeit sowie ein erhöhter Transport partikelinterner Wärmestrahlung durch die Verwendung eines anderen Modells können zwar zu einer besseren Übereinstimmung in Hinblick auf die Kerntemperatur beitragen, dies geht allerdings erheblich zu Lasten der Massenabnahme in Abbildung 6.2 b. In Bezug auf die Massenabnahme korrelieren Messung und Rechnung durch die verwendeten Materialeigenschaften jedoch sehr gut. Gesteigerter Wärmetransport im Inneren des Partikels führt hier zu einem schnelleren Fortschritt von Trocknung und Pyrolyse, sodass die thermochemische Konversion frühzeitig abschließt. In Konsequenz ergibt sich eine bessere Übereinstimmung der Kerntemperatur zu einer schnelleren Umwandlung und ist somit Auslöser für größere Abweichungen bezogen auf den Massenverlauf.

Lu et al. [107, 108] kamen in ihren numerischen Untersuchungen zu ähnlichen Differenzen hinsichtlich des Kerntemperaturverlaufs. Die Autoren konkludierten größere Abweichungen bei der messtechnischen Erfassung des Temperaturwertes. Als Ursache wurde eine Erwärmung des Temperaturmessfühlers durch die heiße Gasphase und damit verbundene Wärmeleitung im Inneren des Thermoelementes identifiziert. Dieser Effekt wird an später folgenden Validierungsfällen besser deutlich.

In Abbildung 6.3 sind die Ergebnisse eines weiteren Validierungsfalls illustriert. Betrachtet wird hier die thermochemische Umwandlung eines nahezu trockenen Pappelpartikels (6,0 Ma.-% Wasser), welches dieselbe Geometrie wie im zuvor erläuterten Fall besitzt.



(a)



(b)

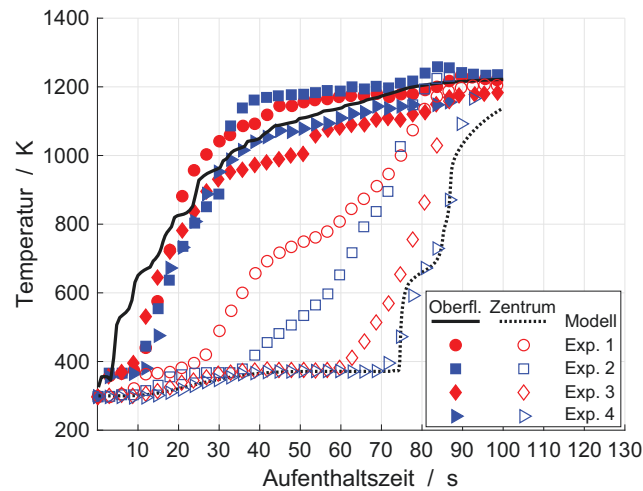
Abb. 6.3: Vergleich von Messung und Simulation für die Pyrolyse eines Pappelteilchens in Stickstoff ($d_p = 9,5 \text{ mm}$, $l_p = 9,5 \text{ mm}$ und 6 Ma.-% Wasser); Experimentelle Daten entstammen aus [107]

Die Oberflächentemperatur in Abbildung 6.3 verzeichnet unmittelbar zu Beginn der Konversion einen rapiden Temperaturanstieg. Aufgrund des geringen Wasseran-

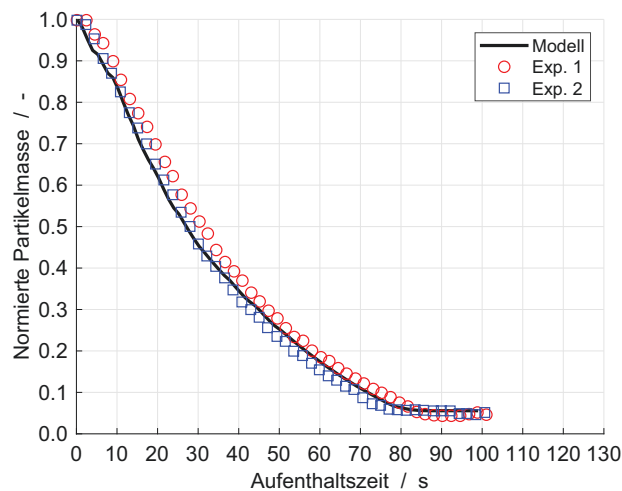
teils kann der Trocknungsvorgang die externe Wärmezufuhr nicht kompensieren, sodass das anfängliche Temperaturplateau des vorherigen Falls ausbleibt. Im Vergleich zum vorherigen Validierungsfall (Abb. 6.2) heizt sich auch das Partikelzentrum erheblich schneller auf, da der endotherme Effekt der Trocknung internem Wärmetransport kaum entgegenwirkt. Aus diesem Sachverhalt resultiert insgesamt eine erheblich verkürzte Konversionszeit gegenüber dem ersten Validierungsfall, siehe Abbildung 6.3 b. Eine gute Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung erzielt das Modell auch hier bezüglich der Verläufe von Oberflächentemperatur und Massenabnahme. Zwar erreicht das Modell qualitativ eine hinreichend genaue Beschreibung vom Verlauf der Kerntemperatur, quantitativ ergeben sich jedoch auch hier größere Abweichungen.

Um den Einfluss des Messprinzips auf die Güte der Kerntemperaturbestimmung zu untersuchen, führten Lu et al. weitere Experimente durch. Hierbei erfolgte die Installation des Thermoelementes einerseits radial zum Probenkörper, andererseits entlang dessen Achse. Auf der Grundlage von Pappelpartikeln mit erheblich längerem Seitenverhältnis ($d_p = 9,5 \text{ mm}$ und $l_p = 38 \text{ mm}$) sollte so der Einfluss einer längeren Isolationsstrecke gegen die heiße Gasphase analysiert werden. Abbildung 6.4 illustriert Ergebnisse dieser Untersuchung für ein Pappelpartikel mit einem Wasseranteil von 40 Ma.-%. Aus Abbildung 6.4 a ist zu entnehmen, dass sich in Abhängigkeit des Messaufbaus eine weite Streuung bezüglich der Kerntemperatur ergibt. Der im Anschluss an die Trocknung folgende Temperaturanstieg setzt im Falle der radialen Installation (Experiment 1 und 2) deutlich früher ein. Die mittels axialer Ausrichtung des Thermoelementes bestimmten Verläufe (Experiment 3 und 4) deuten hingegen auf eine längere Trocknungsdauer hin. Der die Pyrolyse initialisierende Temperaturanstieg verschiebt sich infolgedessen auf einen späteren Zeitpunkt. Aufgrund dieser Resultate ist davon auszugehen, dass innerhalb des Thermoelementes auftretende Leitung zu einer Beeinflussung der Messung führt. Wegen der besseren Isolation gegen die heiße Umgebung sind die axial gemessenen Verläufe (Experiment 3 und 4) als vertrauenswürdiger einzustufen.

Insgesamt verhalten sich Oberflächentemperatur und Massenabnahme analog dem ersten Validierungsfall. Ausgenommen ist hier die längere Konversionsdauer aufgrund der höheren Partikelmasse. Das Modell erreicht eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messdaten. Dies gilt neben den bisher gut getroffenen Verläufen von Oberflächentemperatur und Masse auch für die axial gemessene Kerntemperatur.



(a)

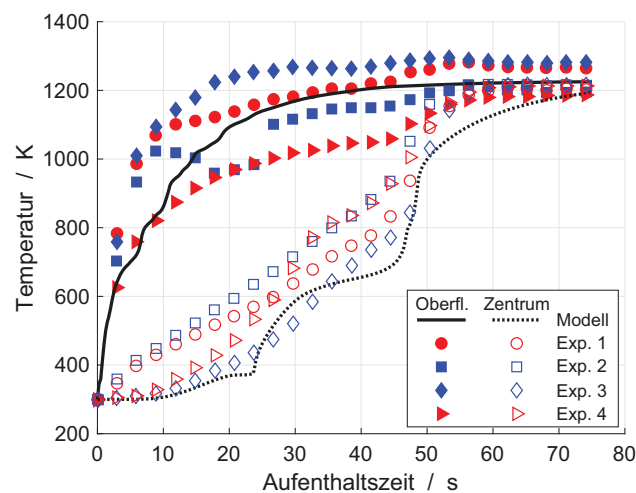


(b)

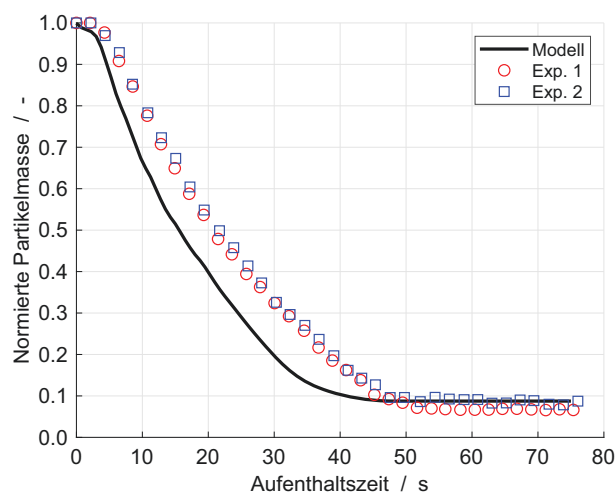
Abb. 6.4: Vergleich von Messung und Simulation für die Pyrolyse eines Pappelteilchens in Stickstoff ($d_p = 9,5$ mm, $l_p = 38$ mm und 40 Ma.-% Wasser); Experimentelle Daten entstammen aus [107]

Dasselbe Vorgehen zur Analyse des Einflusses des Messprinzips fand weiterhin für ein nahezu trockenes Brennstoffteilchen ($d_p = 9,5$ mm, $l_p = 38$ mm und 6 Ma.-% Wasser) Anwendung. Auch hier resultieren in Abhängigkeit der Installation des Temperaturmessfühlers unterschiedliche Kerntemperaturverläufe, siehe Abbildung 6.5 a. Den Beobachtungen des vorherigen Falls entsprechend, legen die axial durchgeführten Messungen einen langsameren Temperaturanstieg im Zentrum des Teilchens dar. Sie

sind tendenziell als vertrauenswürdiger zu bewerten. Vor dem Hintergrund agiert das Modell hinsichtlich der Temperaturbestimmung zuverlässig und erreicht eine gute quantitative Übereinstimmung. Die errechnete Massenreduktion korreliert qualitativ ebenfalls gut mit Messdaten, siehe Abbildung 6.5 b.



(a)



(b)

Abb. 6.5: Vergleich von Messung und Simulation für die Pyrolyse eines Pappelteilchens in Stickstoff ($d_p = 9,5$ mm, $l_p = 38$ mm und 6 Ma.-% Wasser); Experimentelle Daten entstammen aus [107]

6.1.2 Verbrennung

Dieser Abschnitt widmet sich der Validierung des Partikelmodells unter verbrennungstypischen Konditionen. Im Gegensatz zu den bisherigen Validierungsfällen, bei denen Verbrennungsprozesse am Restkoks und in der umliegenden Gasphase aufgrund des fehlenden Sauerstoffs ausblieben, nehmen diese im jetzt betrachteten Fall eine zentrale Rolle ein. Die exotherme Wirkung des Koksausbrandes und die Verbrennung freigesetzter Pyrolysegase führen zu einer stärkeren Aufheizung des Brennstoffteilchens und resultieren insgesamt in einem höheren Temperaturniveau. Betrachtet wird hier die Verbrennung eines Pappelpartikels mit einem Durchmesser $d_p = 9,5 \text{ mm}$ und einer Länge $l_p = 9,5 \text{ mm}$. Der Wasseranteil des Brennstoffs liegt bei 40 Ma.-%. Die Brennstoffprobe besitzt demnach dieselbe Beschaffenheit wie der erste Validierungsfall unter pyrolytischen Bedingungen (Abbildung 6.2).

In Analogie zu den vorangegangenen Untersuchungen beginnt die thermochemische Umwandlung des Brennstoffteilchens mit Trocknungsprozessen auf der Oberfläche. Die Endothermie der Vorgänge führt innerhalb der ersten Sekunden zu einer Abkühlung der umliegenden Gasphase, wie in Abbildung 6.6 (1 s) illustriert ist. Ist das Wasser auf der Partikeloberfläche verbraucht, schreitet die Trocknungsfront weiter in das Innere voran. In den äußeren Bereichen des Teilchens führt der einsetzende Temperaturanstieg zur pyrolytischen Zersetzung der Biomassepolymere. Die damit in Verbindung stehende Freisetzung brennbarer Spezies dient als Initiator für chemische Reaktionen in der Gasphase. Entweichen Teer, Methan, Kohlenmonoxid und Wasserstoff in ausreichenden Mengen, so kommt es um die Brennstoffprobe zur Ausprägung einer Flamme, siehe Abbildung 6.6 (20 s und 40 s). Anhaltende Verbrennungsprozesse in der umgebenden Gasphase sowie auf der Oberfläche des Brennstoffs einsetzende Koksreaktionen bewirken eine starke Aufheizung des Teilchens und einen schnelleren Fortschritt von Trocknung und Pyrolyse. Mit steigender Distanz der Umwandlungszonen zur Teilchenoberfläche verlieren die Konversionsvorgänge im Verlauf der Verbrennung jedoch zunehmend an Intensität. Wie aus Abbildung 6.6 ersichtlich ist, ist der Verbrennungsprozess nach etwa 60 s weitgehend abgeschlossen. Eine Ausnahme bilden anhaltende und langsam fortschreitende Koksabbaureaktionen im Inneren des Teilchens.

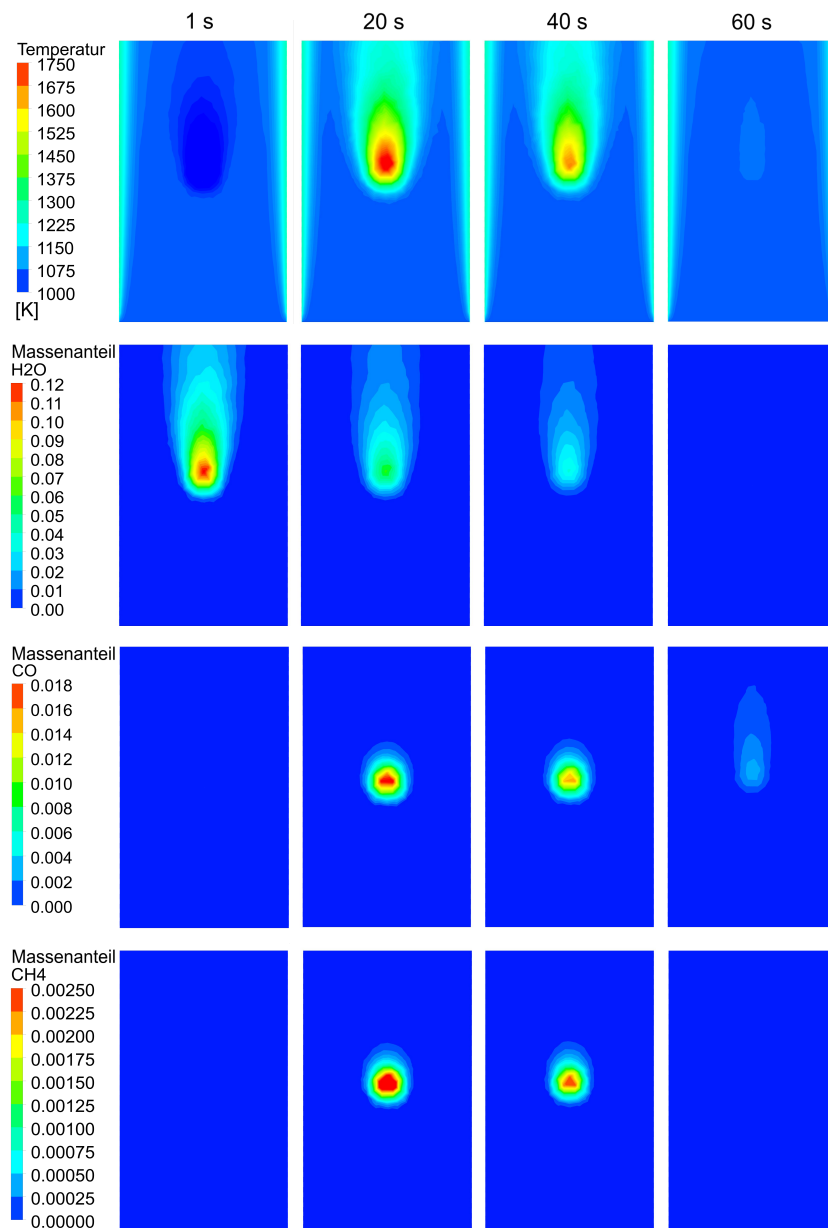


Abb. 6.6: Kontur von Temperatur, H₂O-, CO- und CH₄-Massenanteil in der umliegenden Gasphase eines verbrennenden Pappelteilchens zu unterschiedlichen Zeitpunkten

Eine andere Darstellung der beschriebenen Vorgänge gibt Abbildung 6.7 anhand der Komposition des Brennstoffteilchens im Verlauf der Konversionsvorgänge. Es ist zu erkennen, dass aus den Trocknungsprozessen, die unmittelbar zu Beginn der Um-

wandlung einsetzen, eine rapide Abnahme des Wasseranteils ergeht, wobei das im Brennstoff enthaltene Wasser nach etwa 44 s vollständig verbraucht wurde. Mit der Reduktion der Brennstofffeuchte ergibt sich zunächst eine Zunahme des Holzmassenanteils, welcher bei 40 s sein Maximum findet. Ist das im Brennstoff vorkommende Wasser vollständig entwichen, führen anhaltende Zersetzungsprozesse der Biopolymere zu einer schnellen Abnahme des Holzanteils. Die Zerstörung der Biomasseverbindungen ist nach etwa 53 s abgeschlossen. Das Zusammenspiel zwischen Bildung des Kokes durch Pyrolyse und dem Abbau des Rückstands durch heterogene Reaktionen erstreckt sich über einen weiten Zeitraum von 7 s bis 80 s. Der insgesamt höchste Restkoksanteil ist bei etwa 52 s zu verzeichnen, kurz vor Beendigung der Pyrolyse. Nach Abschluss der Zersetzungsreaktionen des Holzes wird der Anteil des Restkokes lediglich durch Abbauvorgänge beeinflusst. Nach etwa 80 s ist der Rückstand vollständig umgesetzt. Ab diesem Zeitpunkt besteht das Teilchen lediglich aus der Asche, die im Zuge der Koksreaktionen freigesetzt wurde.

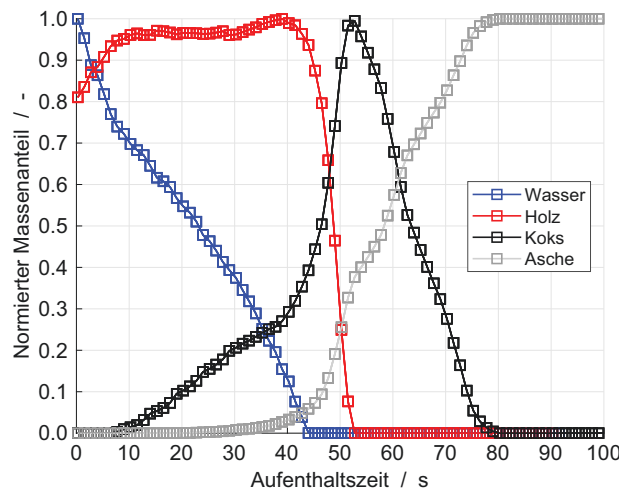
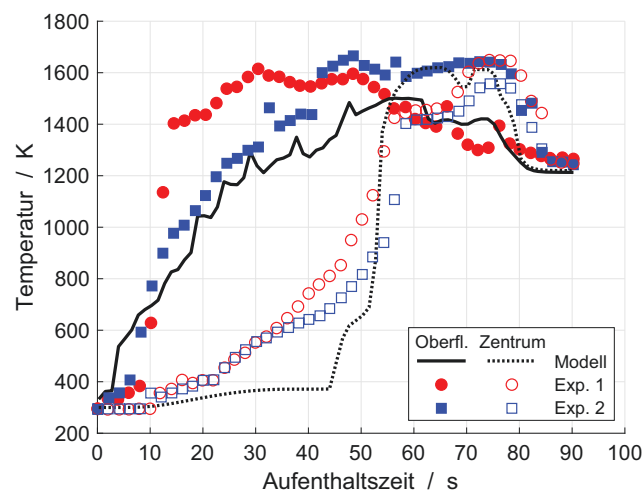


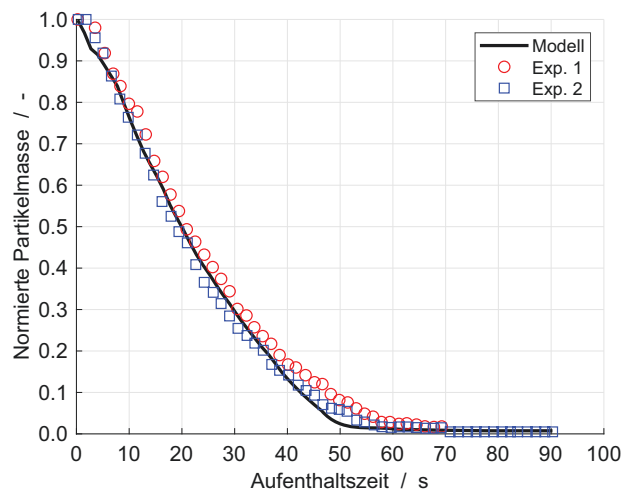
Abb. 6.7: Normierte Massenanteile von Wasser, Holz, Koks und Asche während der Verbrennung eines Pappelteilchens

Die Überlagerung von homogener Gasphasenverbrennung und der exothermen Wirkung des Koksabbaus führt im Vergleich zu den Validierungsfällen unter inerter Atmosphäre zu signifikant höheren Partikeltemperaturen. Dies geht aus der Darstellung der errechneten Oberflächen- und Kerntemperatur in Abbildung 6.8 a hervor. Die umliegende Flamme unterstützt die Aufheizung des Partikels, wobei die insgesamt höchsten Temperaturen auf der Teilchenoberfläche während des dort anhaltenden

Koksabbaus zu beobachten sind. Je weiter sich die Reaktionszone in Richtung des Zentrums bewegt, desto mehr kühlt die Oberfläche anschließend herunter. In diesem Zusammenhang ist im Zentrum ein Temperaturniveau zu beobachten, welches über dem der Oberfläche liegt. Aufgrund der nur schwach glimmenden Flamme findet jetzt die höchste Energiefreisetzung im Inneren des Teilchens statt. Nach etwa 80 s ist das Restkoks im Kern des Brennstoffteilchens konvertiert und der Verbrennungsvorgang vollständig abgeschlossen.



(a)



(b)

Abb. 6.8: Vergleich von Messung und Simulation für die Verbrennung eines Paperteilchens in Luft ($d_p = 9,5 \text{ mm}$, $l_p = 9,5 \text{ mm}$ und 40 Ma.-% Wasser); Experimentelle Daten entstammen aus [107]

Das reduzierte 1D-Partikelmodell erreicht auch unter Verbrennungsbedingungen eine hohe Ergebnisgüte, wie aus Abbildung 6.8 ersichtlich wird. Insbesondere gilt dies für den Verlauf der Oberflächentemperatur als auch die in Abbildung 6.8 b dargestellte Massenabnahme. Wie in den zuvor betrachteten Validierungsfällen mit selber Teilchengeometrie und Anordnung des Messsystems ergeben sich jedoch zwischen Messung und Simulation größere Abweichungen bezüglich des Kerntemperaturverlaufs. Dies bezieht sich vor allem auf die Trocknungsphase. Als Ursache wird hier ebenfalls ein Messfehler vermutet. Hinsichtlich der berechneten Kerntemperatur ist außerdem auf das Überschwingen im Zeitbereich von etwa 55 s bis 70 s hinzuweisen, das in Verbindung mit der leicht erhöhten Massenabnahme des Teilchens zwischen 40 s und 55 s zu sehen ist. Auslöser dieses Modellverhaltens ist vermutlich ein zu schneller Fortschritt des Koksabbrandes aufgrund getroffener Vereinfachungen. Es wird davon ausgegangen, dass die Vernachlässigung von Vergasungsreaktionen durch austretende Produkte dieses Verhalten bedingt. Für das weitere Vorgehen ist dieser Sachverhalt allerdings von untergeordneter Bedeutung.

6.2 Festbettverbrennung

Für die Validierung der CFD-DEM-Methodik unten Festbettbedingungen werden experimentelle Daten von Mahmoudi et al. [83] herangezogen. Die Autoren untersuchten die Verbrennung von Holzhackgut aus Buchenholz in einem Batch-Reaktor sowohl mittels numerischer Methoden als auch durch Experimente an einer Laboranlage. Der Laborreaktor besitzt einen inneren Durchmesser von 0,2 m und eine Höhe von 4,55 m. Er ist zweifach isoliert, um eine geringe Wärmeabgabe an die Umgebung zu gewährleisten. Im Inneren befindet sich ein Rost, auf dem Hackschnitzel mit einer Größe von 6,0 bis 10,0 mm bis zu einer Höhe von 0,5 m geschichtet sind. Durch den Rost erfolgt die Zugabe der Verbrennungsluft mit einem konstanten Normvolumenstrom von $16,95 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$. Mit Hilfe einer elektrischen Heizung kann die Primärluft vorgewärmt werden. Überdies ermöglicht die Zugabe von Stickstoff eine Variation des Sauerstoffgehaltes innerhalb der Verbrennungsluft. Während der Versuche wurde die Temperatur in verschiedenen Höhen des Brennstoffbettes (2,5 cm, 10 cm und 17,5 cm) mittels Thermoelement vom Typ K gemessen. Darüber hinaus wurde die globale Massenabnahme des Brennstoffbettes durch eine Wipotec EC-FS Wägezelle erfasst [175]. Ein Schema des Versuchsaufbaus gibt Abbildung 6.9.

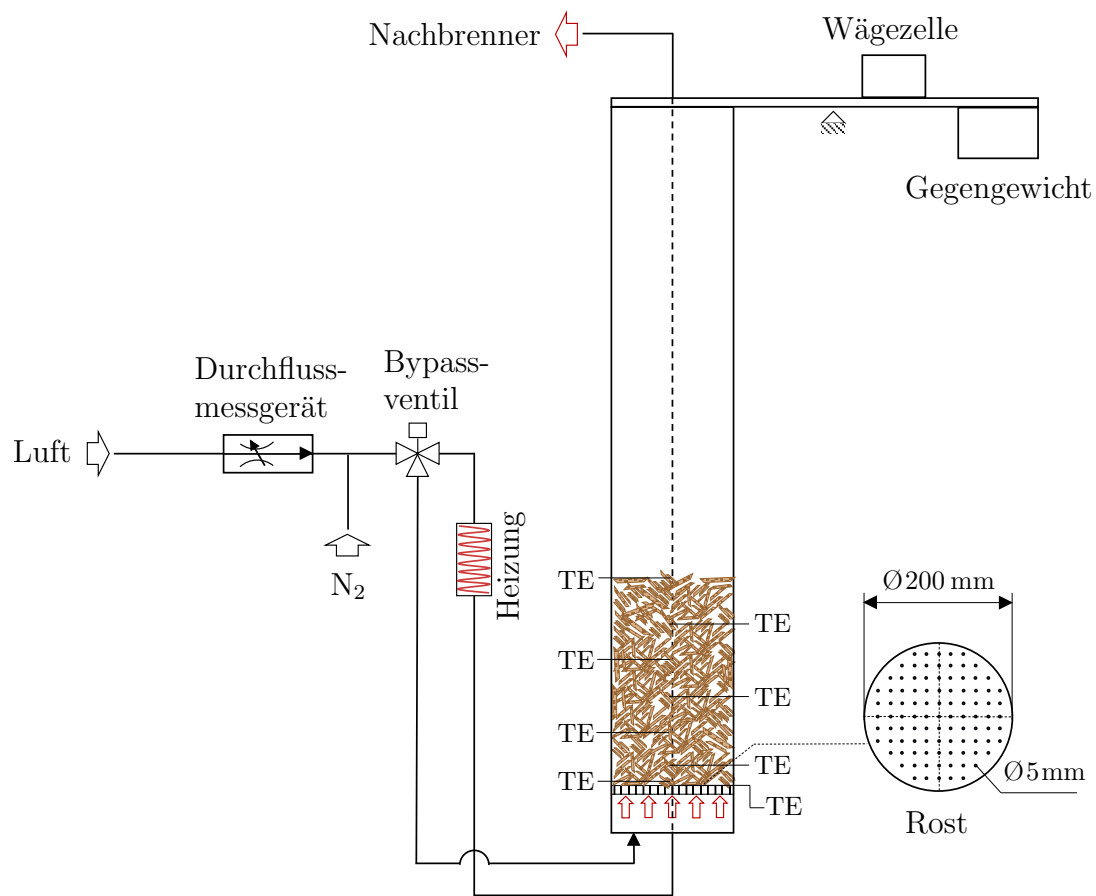


Abb. 6.9: Schematische Darstellung von Messaufbau und Festbettreaktor zur Analyse der Buchenholzverbrennung nach [83] S. 575

Zu Beginn der Versuche dominieren Trocknung und Pyrolyse die Konversion des Brennstoffs. So lange diese Prozesse im unteren Teil des Bettes anhalten, wird der Sauerstoffgehalt der Verbrennungsluft auf 3 Vol.-% herabgesenkt. Die Primärlufttemperatur beträgt zu dieser Zeit 250 °C. Ist die Pyrolyse weitgehend abgeschlossen und Koksbrand maßgebend, so wird die Verbrennungsluft mittels Bypass-Ventil am Heizelement vorbeigeleitet und mit Umgebungstemperatur der Verbrennung zugeführt. Der Sauerstoffanteil wird während des Koksbrandes auf 10 Vol.-% angehoben. Für weitergehende Informationen bezüglich der experimentellen Untersuchungen sei an dieser Stelle auf die Arbeiten von Mahmoudi et al. [83] und Markovic et al. [175] verwiesen.

Im Rahmen der durchgeführten Simulation wird das Festbett als monodisperse Schüttung aus insgesamt 1200 Partikelpaketen (45 Partikel pro Paket) betrachtet. Die einzelnen Partikel erhalten dabei einen mittleren Durchmesser von 7,0 mm. Auf jedes Teilchen wird das in Kapitel 5 beschriebene und zuvor am einzelnen Holzteilchen validierte Partikelmodell angewendet. In diesem Zusammenhang offenbarte sich jedoch eine Schwäche des Modells dahingehend, dass die pyrolytische Umwandlung des Holzes unter der Primärlufttemperatur des Festbettes (250 °C) zu schleppend verläuft. Innerhalb des hier betrachteten Festbettes spielt Selbstzündung eine wesentliche Rolle. Diese wird durch eine ausreichend hohe Konzentration flüchtiger Bestandteile in der Gasphase erreicht. Die Verwendung des Standardsatzes an Kinetikparametern resultiert in einer zu geringen Freisetzung reaktiver Gase, sodass die Zündung ausbleibt. Aus diesem Grund wurden die Kinetikparameter der Hemicellulose nachträglich adaptiert, wie zuvor unter Abschnitt 5.2.5 bereits erklärt wurde (Siehe hierzu außerdem Abschnitt A-1 des Anhangs). Abschließend ist zu erwähnen, dass Schrumpfungsvorgänge während der Pyrolyse vernachlässigt werden.

Die Umwandlung innerhalb des Brennstoffbettes beginnt zunächst mit einer Erwärmung der nah am Rost befindlichen Holzhackschnitzel durch die Zufuhr der vorgewärmten Verbrennungsluft. Der Anstieg der Teilchentemperatur bedingt eine Zunahme des Sättigungsdampfdrucks des innerhalb der Partikel vorhandenen Wassers. Infolgedessen kommt es zu einem Anstieg der Verdunstung und einer gemächlichen Abnahme der Partikel- und Bettmasse. Ab etwa 200 Sekunden Betriebsdauer und einer Teilchentemperatur von etwa 310 K wirkt die Endothermie intensivierter Trocknungsvorgänge einer weiteren Temperaturerhöhung massiv entgegen, sodass lediglich ein leichter Temperaturanstieg zu verzeichnen ist. Wegen der insgesamt sehr langsamen Erwärmung sind Temperaturgradienten im Inneren der Partikel nur sehr schwach ausgeprägt. Die Trocknungsphase und die damit verbundene schleichende Temperaturerhöhung hält an, bis das Partikel vollständig getrocknet ist. Für Brennstoffteilchen mit einem Abstand zum Rost von 2,5 cm ist dieser Zustand nach etwa 370 Sekunden erreicht. Bis zu diesem Zeitpunkt verläuft die Trocknung höher im Bett befindlicher Teilchen schleppend oder wird gar inhibiert. Dies ist zum einen auf eine erhöhte Dampfkonzentration innerhalb der Gasphase, zum anderen auf die endotherme Wirkung der Verdunstung in den unteren Lagen zurückzuführen. Aus diesem Sachverhalt resultiert eine Trocknungsfront, welche sich bei Temperaturen von 310-320 K in Strömungsrichtung (von unten nach oben) durch das Bett be-

wegt. Die Trocknungsfront erreicht das obere Ende des Brennstoffbettes nach ca. 2800 Sekunden. Nach etwa 3200 Sekunden ist die Trocknung des Brennstoffbettes vervollständigt. Der beschriebene Verlauf der Trocknung geht aus der nachfolgenden Darstellung des Wasseranteils der Partikel hervor.

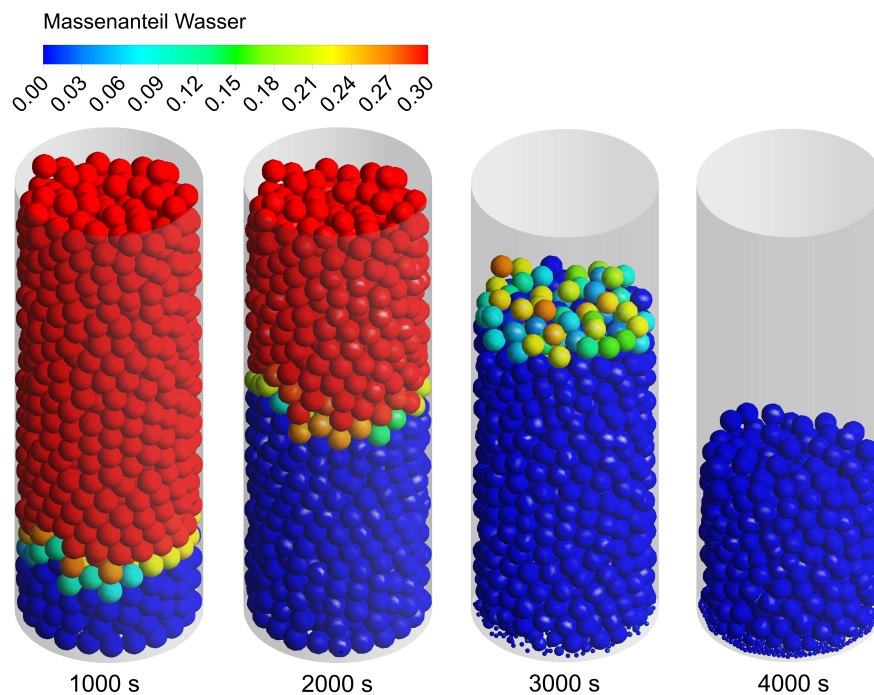


Abb. 6.10: Wassermassenanteil der Partikel bei unterschiedlichen Zeitpunkten

Ist das Wasser in den unteren Schichten des Brennstoffbettes ausgetrieben, folgt ein rascher Temperaturanstieg auf das Verbrennungsluftniveau. Im Zuge dieser Aufheizung setzt die thermische Zersetzung der Hemicellulose ein, was zur Freisetzung brennbarer Gase führt und im Zusammenspiel mit der Brennstofftrocknung die Massenabnahme des Brennstoffbettes ab etwa 1200 Sekunden erheblich beschleunigt. Durch die Reaktion des freigesetzten Teers und Wasserstoffs mit dem verfügbaren Sauerstoff kommt es in einer Schichthöhe von etwa 10 cm zur Selbstzündung, welche die Teilchentemperatur auf ein Niveau oberhalb der zugeführten Verbrennungsluft anhebt. Dieser Zustand stellt sich nach einer Betriebsdauer von etwa 1250 Sekunden ein. Erreichen die hier vorhandenen Partikel Temperaturwerte jenseits der 600 K folgt ein beschleunigter Zerfall von Cellulose und Lignin, was das Temperaturniveau abermals erhöht. In dieser Phase erreichen die Partikel Temperaturen von bis zu

850 K. Grundsätzlich kommt es durch die Selbstzündungsfront zur Ausprägung von zwei Pyrolysezonen, die sich entgegengesetzt durch das Bett bewegen. Einerseits folgt wegen der Verbrennungsprozesse in der Gasphase eine Aufheizung der stromaufwärts befindlichen Teilchen. Hieraus resultiert eine Pyrolysezone, die sich der Bewegung der Trocknungszone in Strömungsrichtung anschließt. Zum anderen stehen die Brennstoffpartikel, welche sich unterhalb der Selbstzündungszone befinden, nun verstärkt unter Strahlungseinfluss der aufgeheizten Brennstoffteilchen. Die einfallende Wärmestrahlung wirkt der kühlenden Wirkung der verhältnismäßig kalten Primärluft entgegen und führt zur langsamen Erwärmung tiefer liegender Schichten. Im Ergebnis dieser Aufheizung schreitet eine Pyrolysefront zusätzlich in Richtung des Rostes voran. Während die Hemicellulose der nah am Rost vorhandenen Partikel bereits abgebaut ist, verläuft die Zerstörung von Cellulose und Lignin durch die kühlende Primärluft schleppend und ist erst bei etwa 2600 Sekunden abgeschlossen. Die Pyrolyse der oberen Bettbereiche hält deutlich länger an. Hier endet der Abbau der Biopolymere erst nach 3500 Sekunden. Die zeitliche Entwicklung des Holzanteils innerhalb der Partikel ist in Abbildung 6.11 veranschaulicht.

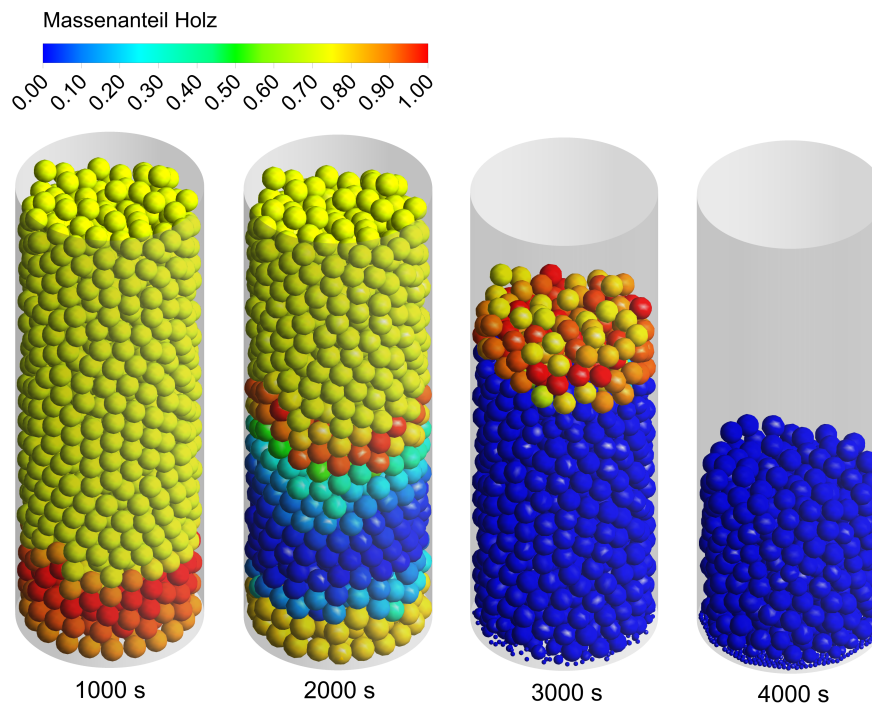


Abb. 6.11: Holzmassenanteil der Partikel bei unterschiedlichen Zeitpunkten

Der Koksabbrand verläuft bis zum Eintrag der sauerstoffreicheren Verbrennungsluft (2570 Sekunden) langsam, obwohl die Pyrolyse bereits in weiten Teilen des Bettes durchlaufen wurde. Dieser Umstand ist damit zu erklären, dass der verfügbare Sauerstoff vorrangig durch die Reaktion mit Teer und Wasserstoff, freigesetzt durch die direkt am Rost pyrolysierenden Teilchen, abgebaut wird. Aufgrund des Temperaturniveaus führen Vergasungsprozesse ebenfalls nicht zu einem nennenswerten Verbrauch an Restkoks. Die Intensität des Koksabbaus nimmt allerdings deutlich mit der Zufuhr der sauerstoffreichen Verbrennungsluft zu, da sich die Koksverbrennung erheblich verbessert. Unmittelbar nach der Umstellung der Luftzugabe folgt ein rapider Temperaturanstieg nah am Rost. Dieser ergibt sich zunächst noch durch die Verbrennung der Produkte anhaltender Pyrolyseprozesse, führt allerdings zu einem raschen Abschluss selbiger und mündet in intensivem Koksabbrand. Das gestiegene Temperaturniveau fördert zudem die Vergasung des Rückstands durch das gebildete CO_2 . Da hier kein Wasserdampf verfügbar ist, spielt die Wasserdampfvergasung keine Rolle. Der Abbau des Koks hält grundsätzlich bis zum Ende der Betrachtungsdauer (und darüber hinaus) an, wie Abbildung 6.12 darlegt.

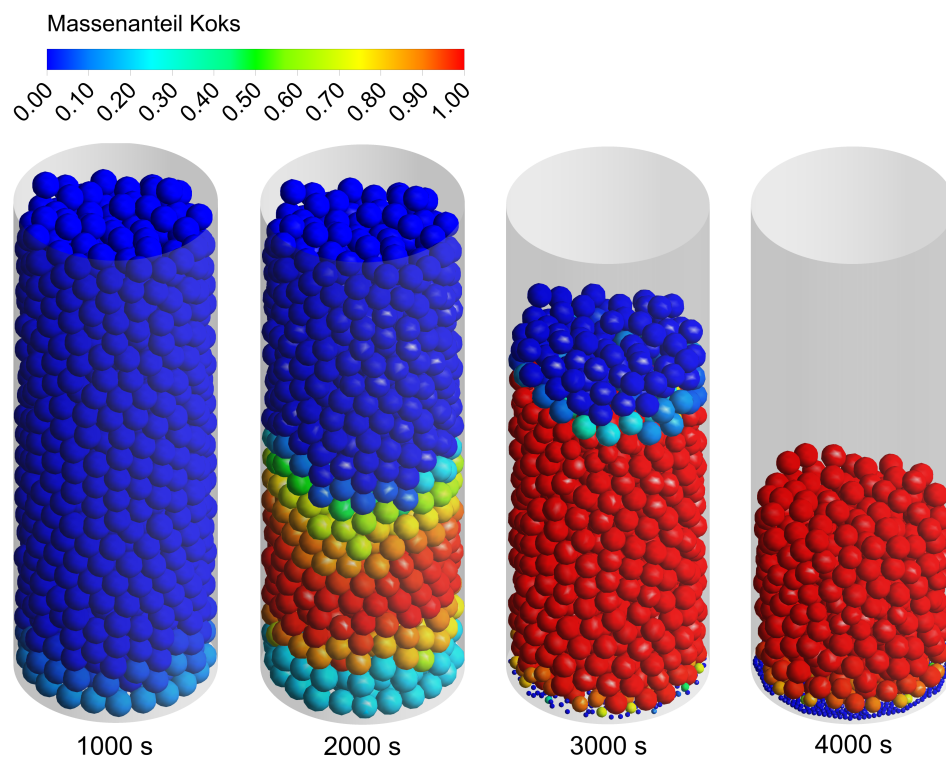
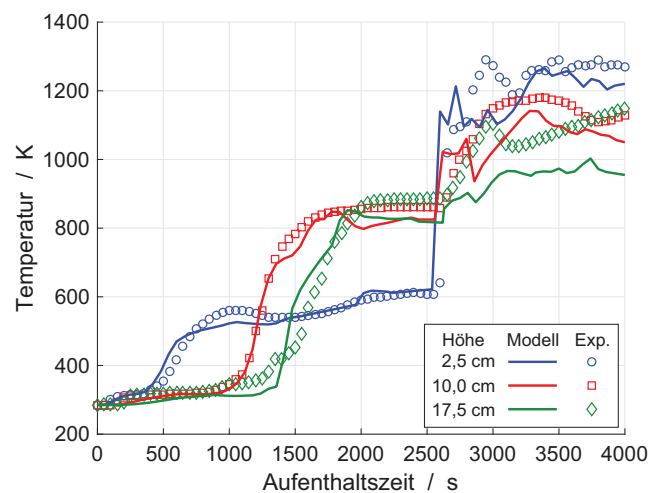


Abb. 6.12: Koksmassenanteil der Partikel bei unterschiedlichen Zeitpunkten

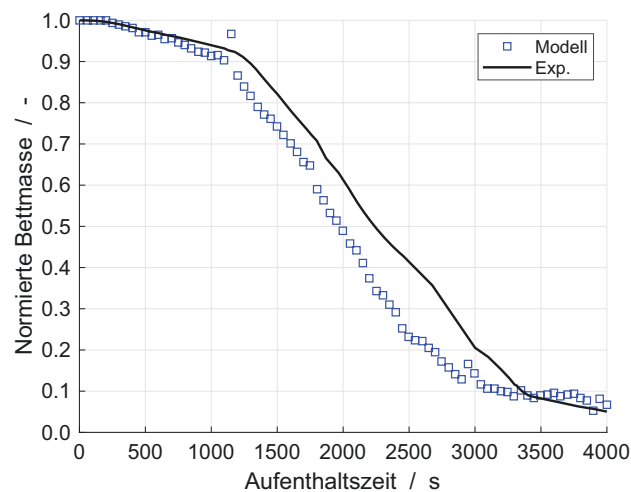
Der intensivere Koksabbau führt ab 2570 Sekunden im Zusammenspiel mit anhaltenden Trocknungs- und Pyrolysevorgängen zu einer abermals beschleunigten Massenabnahme des Bettes. Ferner erfahren die Koksteilchen ab hier eine gravierende Größenreduktion, die sich ebenfalls auf die Schichtdicke des Festbettes auswirkt. Zum Ende der Betrachtungsdauer besitzt das Bett eine Schüttungshöhe von 22 cm, was etwas weniger als der Hälfte des Ursprungswertes entspricht.

Ein Vergleich zwischen Messung und Simulation erfolgt durch Temperaturwerte an verschiedenen Messstellen des Brennstoffbettes (2,5 cm, 10 cm und 17,5 cm Abstand zum Rost) sowie die globale Massenabnahme der Schüttung, beides dargestellt in Abbildung 6.13 auf der nächsten Seite. Die Temperaturwerte der Simulation entsprechen der Oberflächentemperatur von Teilchen an der Symmetrieachse des Reaktors mit unmittelbarer Nähe zur Messstelle. Aus Abbildung 6.13 a wird ersichtlich, dass die Simulation während der initialen Aufheizung sowie der Trocknung eine hohe Ergebnislösungsgüte bezüglich der Temperaturverläufe erreicht. Die Dauer der Trocknungsperiode wird in allen Messstellen sehr gut wiedergegeben. Gleiches gilt in Hinblick auf den durch Selbstzündung hervorgerufenen Temperaturanstieg bei den Messpunkten in 10 cm und 17,5 cm Höhe. Nach dem Einsetzen der Pyrolyse ergibt sich in allen Messpunkten jedoch eine leichte Temperaturdifferenz, wobei die Simulation stets unterhalb des Messwertes verbleibt. Diese resultiert zu Beginn der Bettpyrolyse in 2,5 cm Höhe primär durch eine zu langsame Zersetzung der Polyosen. In den anderen Messpunkten ist die Temperaturdifferenz vorrangig auf einen Mangel an Sauerstoff und eine erhöhte Zerfallsrate der am Rost pyrolysierenden Partikel zurückzuführen. Nach der Umstellung der Verbrennungsluft zeichnet sich in allen Messpunkten ein signifikanter Temperaturanstieg ab, der ebenfalls aus den Simulationsdaten ersichtlich wird. Im nun folgenden Koksbrand korrelieren Messung und Simulation im Messpunkt bei 2,5 cm Betthöhe gut. Allerdings fällt auf, dass der errechnete Verlauf größeren Schwankungen unterliegt. Dies wird durch die Schrumpfung der Kokspartikel und das Nachrutschen zu kalter Teilchen bedingt. Da sich im Abstand von etwa 2,5-5,0 cm vom Rost die Hauptreaktionszone des Ausbrands befindet, herrschen hier die höchsten Temperaturen vor. Ferner wird bis zu dieser Betthöhe der Großteil des Sauerstoffs abgebaut. Teilchen im nächst höheren Messbereich (10 cm) erhalten deutlich sauerstoffärmere Verbrennungsluft. Zudem unterliegen sie einer starken endothermen Wirkung der Vergasung des Kokses durch CO_2 aus der Hauptreaktionszone. Das Temperaturniveau der hier befindlichen Partikel ist aus dem Grund

geringer. Messung und Simulation korrelieren in einer Betthöhe von 10 cm insgesamt recht gut. Einzig der Temperatureinbruch bei etwa 2800 Sekunden differiert von der Messung. Dieser Sachverhalt ist ebenfalls durch das Nachrutschen zu kalter Partikel begründet und zeichnet sich auch in der darüber liegenden Messstelle (17,5 cm) ab, siehe Abb. 6.13.



(a)



(b)

Abb. 6.13: Vergleich von Messung und Simulation für die Festbettverbrennung von Buchenholzhackgut ($d_p = 7,0$ mm und 30 Ma.-% Wasser). Basis für die Temperaturverläufe der Simulation bilden Oberflächentemperaturen der Partikel an der Symmetrieachse des Reaktors. Experimentelle Daten stammen aus [83]

Die Simulation erreicht hinsichtlich der Temperaturverläufe eine hohe Ergebnisgüte. Dennoch ist festzuhalten, dass die Abweichung zwischen Messung und Simulation mit einer Intensivierung des Koksabbaus zunimmt. Größere Differenzen werden durch die Schrumpfung des Bettes und das Nachrutschen zu kalter Teilchen verursacht. Die Verwendung grober Pakete fördert diesen Umstand, da es zur Ausprägung scharfer Gradienten zwischen benachbarten Paketen kommt.

Aus der Darstellung der globalen Massenabnahme des Brennstoffbettes in Abbildung 6.13 b ist eine gute quantitative Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung im Zeitraum von 0-1100 Sekunden zu erkennen. In dieser Zeitperiode dominiert Trocknung die Umwandlung. Mit dem Einsetzen eines intensiveren Zerfalls der Biopolymere ab etwa 1200 Sekunden resultieren jedoch Abweichungen zwischen den Verläufen. Ursachen dafür, dass die Bettmasse innerhalb der Simulation zu langsam sinkt, sind eine zu geringe Abbaurate der Biopolymere und ein limitierter Fortschritt der Trocknung. Beides ist auf etwas zu geringe Prozesstemperaturen zurückzuführen. Bedenkt man allerdings, dass die Vorgänge innerhalb des Festbettes durch monodisperse Partikelpakete angenähert werden, so ist das Ergebnis vertretbar, insbesondere, da die Differenzen ab etwa 3000 Sekunden durch die rapiden Koksabbaureaktionen weitestgehend kompensiert werden. Simulation und Messung stimmen ab diesem Zeitpunkt wieder besser quantitativ überein. Dieses Verhalten setzt sich bis zum Ende der Betrachtungsdauer fort.

6.3 Fazit

Das reduzierte 1D-Partikelmodell agiert zuverlässig in Hinblick auf die thermochemische Konversion einzelner Holzpartikel. Dies gilt sowohl für Umwandlungsprozesse unter inerter Atmosphäre bei Betrachtung unterschiedlicher Teilchenformen- und Wasseranteile als auch die Verbrennung. Ebenso erbringt die entwickelte Methodik zufriedenstellende Resultate für die Festbettverbrennung von Holzhackschnitzeln. Mit Hilfe der Simulation konnte eine hohe Übereinstimmung in Hinblick auf Temperaturverläufe in unterschiedlichen Höhen eines Festbettes als auch dessen globale Massenabnahme erreicht werden. Das in der vorliegenden Arbeit entwickelte Verfahren kann nachfolgend eingesetzt werden, um die Verbrennungsprozesse und Belagsbildung in einer großtechnischen Rostfeuerung zu analysieren.

7 Simulation einer großtechnischen Biomasserostfeuerung

Das in Kapitel 5 vorgestellte CFD-DEM-Simulationskonzept findet Anwendung, um die Verbrennungsprozesse und Belagsbildung in einer realen Biomasseverbrennungsanlage zu untersuchen. Als Referenzsystem wird das Biomasseheizkraftwerk der Stadtwerke Neustrelitz GmbH herangezogen. Die im Jahre 2006 in Betrieb genommene Anlage ist heute zentraler Bestandteil der Fernwärmeversorgung der Stadt Neustrelitz und verfügt über eine installierte Leistung von $7,5 \text{ MW}_{\text{el}}$ sowie $17 \text{ MW}_{\text{th}}$. Die jährliche Gesamtenergieproduktion des HKW beläuft sich auf 45.000 MWh Strom sowie 63.000 MWh Nutzwärme. Als Brennstoff kommt Holzhackgut aus Waldrestholz, Baum- und Strauchschnitt zum Einsatz. Die Verwertung des biogenen Festbrennstoffs erfolgt in einer Vorschubrostfeuerung. Eine Außenansicht des Kesselhauses ist in Abbildung 7.1 dargestellt.



Abb. 7.1: Außenansicht des Biomasseheizkraftwerkes der Stadtwerke Neustrelitz GmbH, installierte Leistung der Anlage: $7,5 \text{ MW}_{\text{el}}$ und $17 \text{ MW}_{\text{th}}$

7.1 Brennstoffanalysen

Als Basis der durchzuführenden Simulation wurden neben den in Kapitel 5.5 thematisierten Analysen der entstandenen Ablagerungen verschiedene Untersuchungen durchgeführt, um den verwendeten Brennstoff zu charakterisieren. Wie eingangs erwähnt, verbrennt die Anlage Holzhackgut aus einem Gemisch aus Baum- und Strauchschnitt sowie Waldrestholz. Eine Probe des Brennstoffs ist in der nachfolgenden Abbildung 7.2 dargestellt.



Abb. 7.2: Holzhackgutprobe aus der Referenzanlage

Zur Bestimmung des Wasser-, Koks- und Aschegehaltes der Brennstoffprobe erfolgte eine Auftragsvergabe an das Institut für Energieverfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (IEC) der TU Bergakademie Freiberg. Die Resultate der durchgeführten Immediatanalyse sind in Tabelle 7.1 zusammengefasst.

Tab. 7.1: Immediatanalyse der Brennstoffprobe wie erhalten

Komponente	Wasser	Flüchtige	Fixer Kohlenstoff	Asche (550 °C)
Massenanteil [%]	26,42	60,22	11,93	1,43

Laut Untersuchung besitzt der Brennstoff einen Wasseranteil von ca. 26,42 Ma.-%. Der Anteil flüchtiger Komponenten, die im Zuge pyrolytischer Zersetzung aus dem Brennstoff entweichen, beläuft sich auf 60,22 Ma.-%. Die zurückbleibende Brenn-

stofffraktion (Fixer Kohlenstoff bzw. Restkoks) bestreitet 11,93 Ma.-%. Der Ascheanteil liegt bei etwa 1,43 Ma.-%. Zusätzlich zur Immediatanalyse wurde am IEC der Heizwert der Brennstoffprobe auf etwa $13,5 \text{ MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ bestimmt.

Als weitere Grundlage der Simulation erfolgte die Messung der Korngrößenverteilung des Brennstoffs mit Hilfe einer Siebmaschine, die am Abfall- und Bioenergietechnikum der Universität Rostock zur Verfügung stand. Vorrätig waren insgesamt acht Rundlochsiebe mit Lochweiten von 1 mm bis 63 mm. Die aus drei Messreihen gemittelte Größenverteilung des Brennstoffs geht aus Abbildung 7.3 hervor.

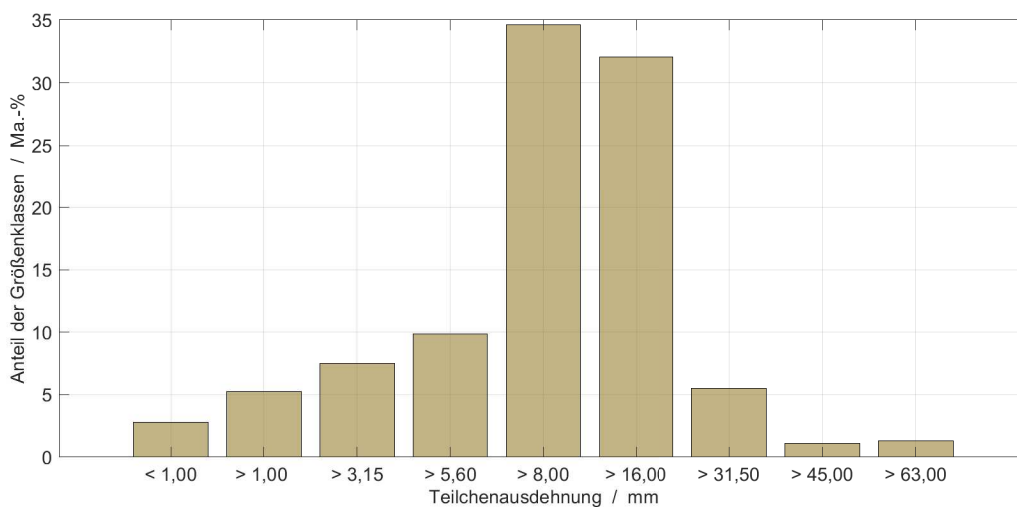


Abb. 7.3: Gemessene Partikelgrößenverteilung der Hackschnitzelprobe

Der Großteil des Brennstoffs konzentriert sich bei Teilchen mit einer maximalen Ausdehnung von 8,0 mm bis 31,5 mm. Größere Bestandteile, die eine Länge von 63 mm überschreiten sind hingegen nur mit einem Anteil von etwa 1,3 Ma.-% vorhanden. Ferner beträgt der für die Ablagerungsbildung potentiell relevante Anteil feiner Partikel ($< 5,6 \text{ mm}$) etwa 15,5 Ma.-%.

Die aufgeführten Brennstoffanalysen sind wesentliche Grundlage für die simulative Nachbildung des Verbrennungsprozesses und der Belagsentstehung in der betrachteten Referenzanlage. Sie sind daher entscheidend für das weitere Vorgehen in dieser Arbeit. Dennoch sind sie lediglich als Anhaltspunkte zur Beschreibung eines Brennstoffs zu sehen, der starken Fluktuationen unterliegt. Dies gilt sowohl für Energiegehalt und Komposition des biogenen Festbrennstoffs als auch die tatsächlich vorzufindende Größenverteilung. Die Analyseergebnisse sind deshalb mit einiger Unsicherheit verbunden.

7.2 Geometrie und Rechengitter

Grundlage der numerischen Simulation bildet ein 3D CAD-Modell von Feuerung und Dampferzeuger der Referenzanlage. Das Kesselmodell erstreckt sich über die Primär- und Sekundärverbrennungszone sowie die Rauchgaszüge 1 bis 3. Aufgrund kaum vorhandener Ablagerungen wird der Economizer in der vorliegenden Arbeit nicht behandelt. Zur Eindämmung des Berechnungsaufwandes wird zudem eine symmetrische Hälfte des Systems betrachtet. Das Kesselmodell ist in der nachfolgenden Abbildung 7.4 illustriert.

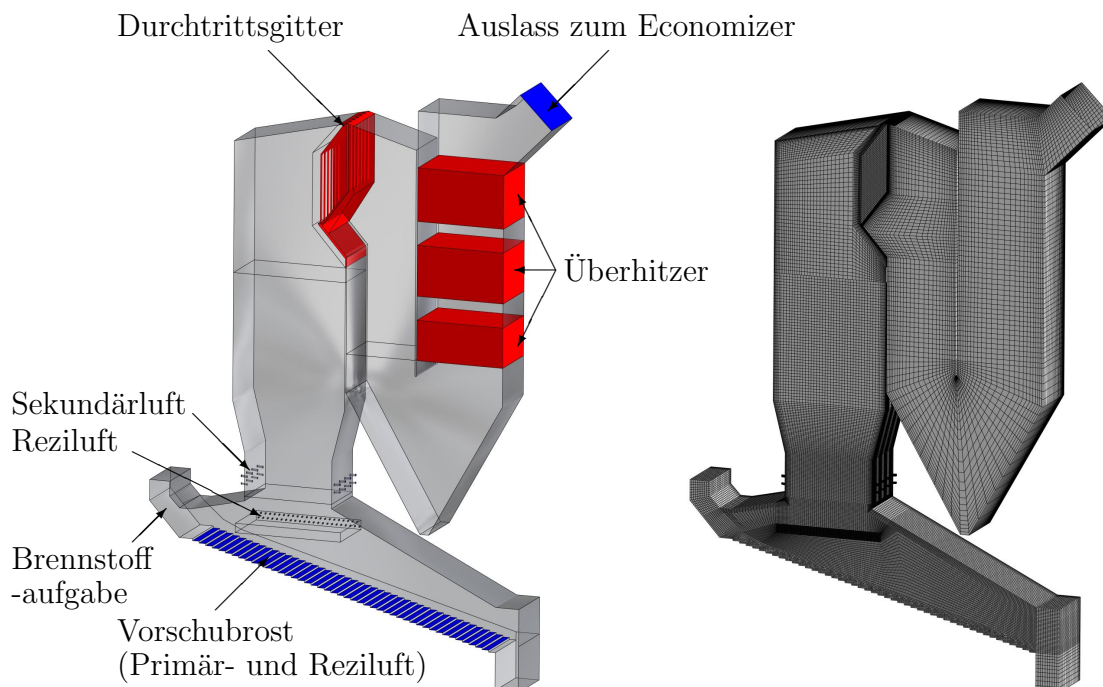


Abb. 7.4: 3D CAD-Modell und Rechengitter von Feuerung und Dampferzeuger der Referenzanlage

Die Feuerung ist mit einer Luftstufung ausgestattet. In fünf unterschiedlichen Rostzonen wird ein Gemisch aus Primärluft und zurückgeführtem Rauchgas (Reziluft) eingebracht. Oberhalb des Rostes, an den seitlichen Feuerraumwänden, wird zur Regelung der Verbrennungstemperatur und zur Stabilisierung des Gesamtprozesses weiteres Rauchgas eingelassen. Für einen vollständigen Ausbrand der auf dem Rost freigesetzten Gase erfolgt an der Verengung zwischen Feuerung und erstem Zug außerdem die Zufuhr von Sekundärluft. Innerhalb der Rauchgasstrecke existieren

verschiedene Einbauten, wie das zwischen dem ersten und zweiten Rauchgaszug befindliche Durchtrittsgitter oder die im dritten Zug platzierten Überhitzer. Ersteres wurde im Rahmen einer Anlagenbegehung als ein durch Ablagerungen hoch belasteter Bereich identifiziert, weshalb die einzelnen Rohre detailliert aufgelöst werden. An den Überhitzerrohren waren hingegen kaum Beläge zu verzeichnen. Vor dem Hintergrund der Zielstellung dieser Arbeit basiert die Behandlung der Überhitzer deshalb auf einem vereinfachten und weniger rechenintensiven Verfahren. Die Rohrbündel werden als poröses Medium abgebildet, siehe Abschnitt A-4 des Anhangs.

Bei der Erstellung des Berechnungsgitters sind in Hinblick auf die beschriebene Simulationsmethodik unterschiedliche Sachverhalte zu berücksichtigen. Einerseits fordern Strömungs- und Verbrennungsvorgänge in der kontinuierlichen Phase sowie die Darstellung des Belagsaufbaus eine hinreichend hohe Gitterdichte. Andererseits unterliegt der Gebrauch des DDPM einer Limitierung bezüglich der Zellmindestgröße, da vorhandene Gitterzellen aus Stabilitätsgründen stets größer als das darin befindliche Partikelpaket ausgeführt sein müssen. Hinsichtlich des Netzes besteht demnach ein Zielkonflikt zwischen einer ausreichenden Auflösung relevanter Gasphasenphänomene und einem möglichst groben Gitter für ein stabiles Simulationsverhalten. Zudem spielt die applizierte Gitterdichte eine entscheidende Rolle für den Berechnungsaufwand, welcher aufgrund der Vielzahl verwendeter chemischer und physikalischer Teilmodelle bereits als sehr hoch eingestuft werden muss. In Abbildung 7.4 ist neben der Kesselgeometrie auch das Rechengitter illustriert, welches aus etwa 1,2 Mio. Hexaederzellen besteht. In unmittelbarer Nähe zum Rost wurde das Gitter aus Stabilitätsgründen gröber gestaltet. In Richtung der Hauptverbrennungszone wurde die Gitterdichte hingegen erhöht, damit Mischungs- und Verbrennungsprozesse hinreichend genau aufgelöst werden. Ebenso wurde auf eine Erhöhung der Gitterdichte in den Nahwandbereichen ablagerungsrelevanter Oberflächen Wert gelegt. Die globalen Qualitätsmerkmale des verwendeten Berechnungsgitters sind in Tabelle 7.2 zusammengetragen.

Tab. 7.2: Qualitätsmerkmale des Berechnungsgitters

Orthogonale Qualität	Skewness	Seitenverhältnis
$\geq 0,41$	$\leq 0,80$	$\leq 28,2$

7.3 Simulationskonfiguration

Ausgangspunkt für die Durchführung der Simulation ist ein stationärer Anlagenbetriebspunkt im nahezu unverschmutzten Zustand. Die zur Bereitstellung der Randbedingungen notwendigen Betriebs- und Materialdaten wurden aus dem Prozessleitsystem und der Anlagendokumentation entnommen. Die Betriebsdaten entstammen einem stabilen Anlagenbetrieb nach kürzlich absolvierter Revision. Bei den aufgezeichneten Messdaten handelt es sich um Primär-, Sekundär- und Reziluftraten sowie -temperaturen und Dampfparameter. Für die spätere Auswertung des Partikelflugs ist insbesondere die Zugabe der Primärluft in den unterschiedlichen Rostbereichen von Bedeutung. Die Primärluftverteilung ist deshalb in Abb. 7.5 veranschaulicht.

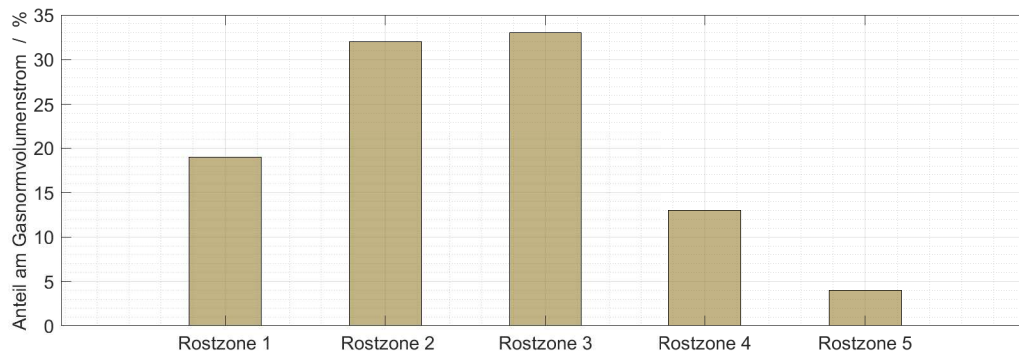


Abb. 7.5: Primärluftverteilung (Primär- + Reziluft unter Rost); Die dargestellten Werte entsprechen dem anteiligen Normvolumenstrom der Rostzone an der gesamten Gaszugabe unterhalb des Rostes

Auffällig in Hinblick auf die Primärluftverteilung ist die hohe Gaszugabe in den ersten drei Rostzonen, wobei insbesondere die Pyrolyse- und Koksausbrandzone (Rostzone 2 und 3) herausstechen. Zur Gewährleistung eines intensiven Ausbrandes wird hier die meiste Luft zugeführt. Im Kontrast hierzu werden in den Zonen 4 und 5 am unteren Ende des Rostes deutlich geringere Gasmengen eingebracht.

Innerhalb der Simulation wird das Brennstoffbett durch ca. 42.000 Pakete aus Buchenholzteilchen approximiert. Das Brennstoffbett erstreckt sich über die gesamte Breite des Kesselmodells und wird mittels Strahlungsquelle gezündet. Jedes Partikelpaket fasst eine definierte Anzahl von Teilchen zusammen, wobei die Partikelgrößenverteilung dem gemessenen Verlauf in Abbildung 7.3 entspricht. Für die Feinstanteile des Brennstoffs, deren längste Ausdehnung kleiner als 1 mm ist, wurde der Partikeldurchmesser auf 0,5 mm festgelegt. In Analogie zu den aufgeführten

Partikelgrößenklassen werden insgesamt 9 Paketgrößen in der Simulation betrachtet. Die dafür genutzte Paketkonfiguration geht aus der Partikelanzahl pro Paket, dargestellt in Abbildung 7.6, hervor.

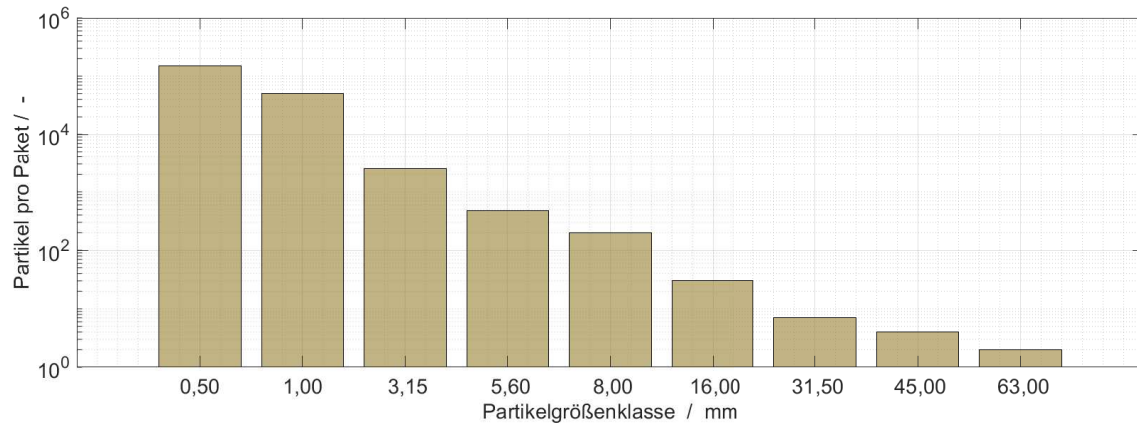


Abb. 7.6: Partikel-Paketkonfiguration für die Simulation der industriellen Referenzanlage

Die gewählte Konfiguration begründet sich vorwiegend durch drei Sachverhalte. Die Zusammenfassung einer großen Anzahl kleiner Partikel erhöht die minimale Kontaktdauer und erlaubt damit die Verwendung einer größeren Zeitschrittweite. Bei zunehmendem Partikeldurchmesser nimmt die Partikelanzahl ab, um einer zu hohen Paketmasse und unphysikalischen Überschneidung der Pakete entgegenzuwirken. Weiterhin resultiert mit der Gesamtanzahl der Pakete ein vertretbarer Berechnungsaufwand von etwa 14 Tagen auf einem HPC-System (6x Intel Xeon E5-2640 v3). Den Gleichungen 5.9 und 5.16 entsprechend, sind für die DEM-Berechnungen verschiedene Parameter gefordert. Eine Zusammenfassung der verwendeten Werte gibt Tabelle 7.3. Dazu sei abschließend erwähnt, dass diese Werte sowohl zur Behandlung von Paket-Paket- als auch Paket-Wand-Interaktionen eingesetzt werden.

Tab. 7.3: Modellparameter für die DEM-Berechnung

Größe	Einheit	Wert	Quelle
k_n	$\text{N} \cdot \text{m}^{-1}$	10.000	
η	—	0,5	[85]
$\mu_{p,r}$	—	0,35	[85]
δt_p	s	$5 \cdot 10^{-5}$	

7.4 Simulationsergebnisse

7.4.1 Brennstoffbett

Ein frisches Holzteilchen durchläuft auf dem Rost zunächst eine Aufheizphase in unmittelbarer Nähe zur Brennstoffaufgabe, gefolgt von Trocknungsprozessen, Pyrolyse und dem Ausbrand des Restkokes. Sowohl die initiale Aufheizphase als auch die Trocknung des Energieträgers durch Verdunstungs- und Siedeprozesse werden maßgeblich durch die vorgewärmte Primärluft sowie aus dem Freeboard einfallende Wärmestrahlung vorangetrieben. Die anfängliche Erwärmung des Brennstoffs hält so lange an, bis das Wasser in höheren Mengen entweicht und die Endothermie der Trocknung einem weiteren Temperaturanstieg entgegenwirkt. Mit schwindendem Abstand zur Hauptverbrennungszone auf dem Rost gewinnt die Brennstofftrocknung zunehmend an Intensität, was zu einer raschen Abnahme der Brennstofffeuchte führt. Abbildung 7.7 verdeutlicht dies anhand des Wasseranteils der einzelnen Partikel.

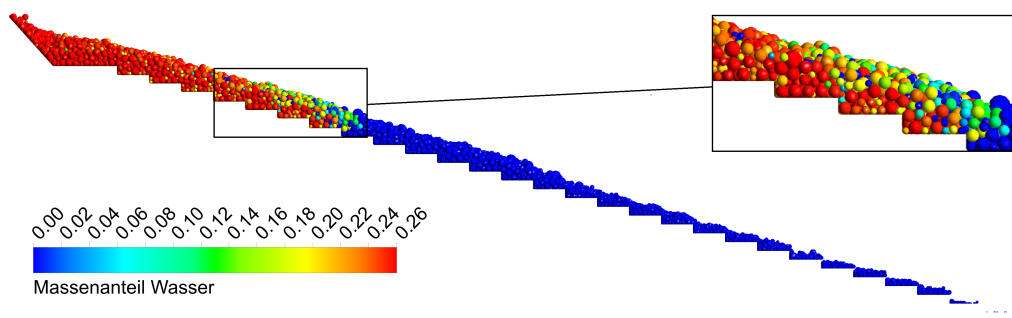


Abb. 7.7: Massenanteil von Wasser der im Brennstoffbett befindlichen Partikel

Für die globale Trocknung des Brennstoffbettes ist Wärmestrahlung von aufgeheizten Wänden und der über der Schüttung befindlichen Flamme essentiell. Wie aus Abbildung 7.7 hervorgeht, trocknet das Holz an der Oberfläche des Bettes deutlich schneller. Im Inneren verläuft die Trocknung durch den fehlenden Strahlungseinfluss insgesamt schleppender und vorwiegend durch langsame Verdunstung des Wassers. Die Effizienz der Verdunstung wird maßgeblich durch die lokale Konstellation der Holzpartikel beeinflusst. Die Anwesenheit unterschiedlicher Größenklassen führt zu einer dichteren Packungsstruktur, infolgedessen geringeren Lückengraden, höheren Gasgeschwindigkeiten und gesteigerter Effizienz von Stoff- und Wärmetransport.

Im Zuge der Trocknung und des damit abnehmenden Wasseranteils erhöht sich zunächst der Polymeranteil innerhalb des Holzes. Ist der Brennstoff oberflächlich trocken, kommt es zunächst zu einer weiteren Aufheizphase, da die Zerstörung der Biopolymere erst ab Temperaturen von etwa 200 °C (≈ 473 K) einsetzt. Ist die Teilchentemperatur hinreichend hoch, folgt durch die Depolymerisationsreaktion ein schneller Abbau der ursprünglichen Makromoleküle, siehe Abbildung 7.8.

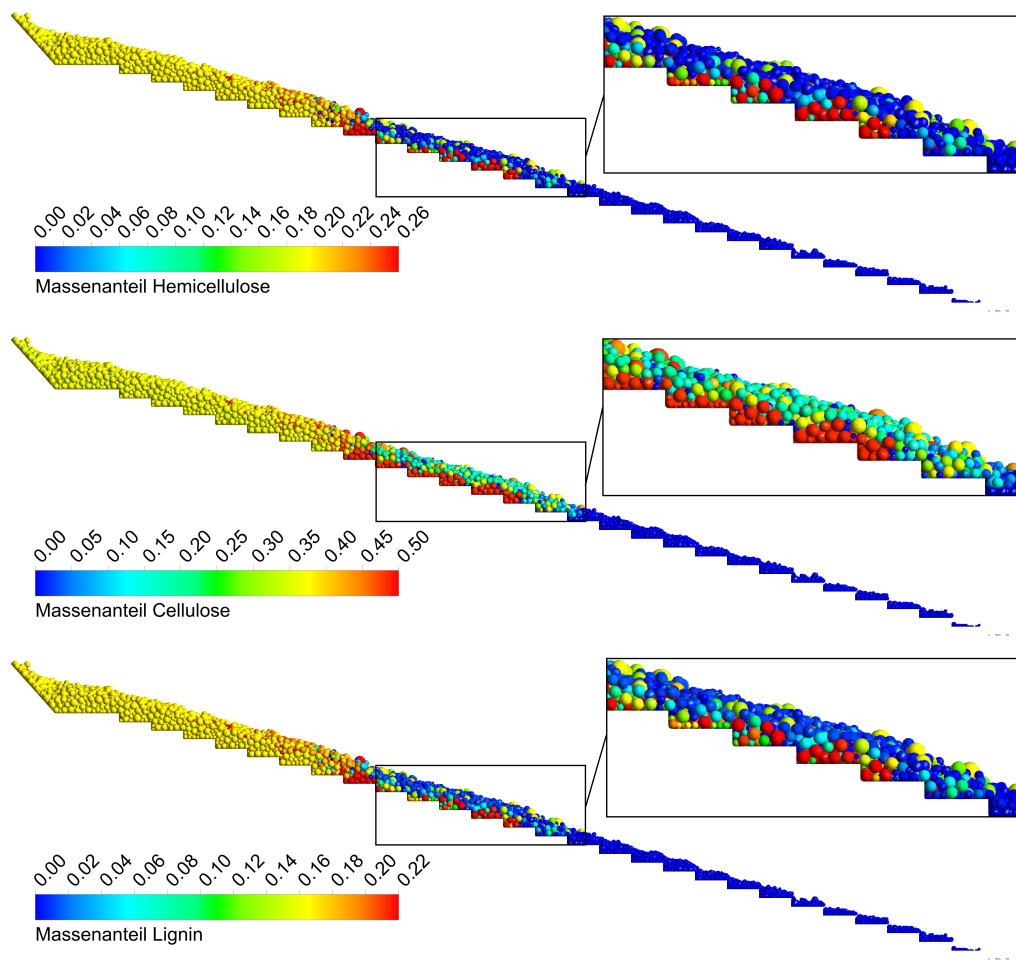


Abb. 7.8: Massenanteile von Hemicellulose, Cellulose und Lignin der im Brennstoffbett befindlichen Partikel

Grundsätzlich ist zu beobachten, dass die Pyrolyse in Analogie zur Trocknung an der Oberfläche des Brennstoffbettes deutlich beschleunigt erfolgt. Dieser Sachverhalt ist ebenfalls dem Einfluss der Freeboardstrahlung geschuldet. Im Kontrast zum sehr schnell agierenden Abbau an der Oberseite wird der Pyrolysefortschritt am

Rost durch die kühlende Wirkung der zugegebenen Primärluft gehemmt. Weiterhin ist der Abbildung 7.8 zu entnehmen, dass sich der Umwandlungsgrad der einzelnen Partikelgrößenklassen deutlich voneinander unterscheidet. Dies ist primär auf den Einfluss des partikelinternen Wärmetransportes zurückzuführen, welcher mit zunehmender Teilchenausdehnung vermehrt den Umwandlungsprozess limitiert. Dies sorgt außerdem dafür, dass sich der Pyrolysefortschritt der einzelnen Biopolymere trotz des unterschiedlichen Zersetzungsverhaltens teils nur geringfügig unterscheidet. Pyrolysierende Holzteilchen in direkter Nähe zur Ausbrandzone stehen zusätzlich zur Strahlung aus dem Freeboard auch unter dem Einfluss der Wärmestrahlung des Koksasbrandes. Aufgrund der direkten Nähe zu glühenden Teilchen ist dieser Einfluss signifikant und führt zu einem schnellen Abbau verbleibender Polymere.

Beim Koksasbrand handelt es sich um den langsamsten Prozess in der thermochemischen Umwandlungskette. Der Abbau des Rückstands wird primär durch die Reaktion mit Sauerstoff bestimmt. Wegen der besseren Sauerstoffverfügbarkeit werden Kokspartikel mit direkter Nähe zum Rost deutlich besser konvertiert als in höheren Lagen befindliche Teilchen, siehe Abb. 7.9.

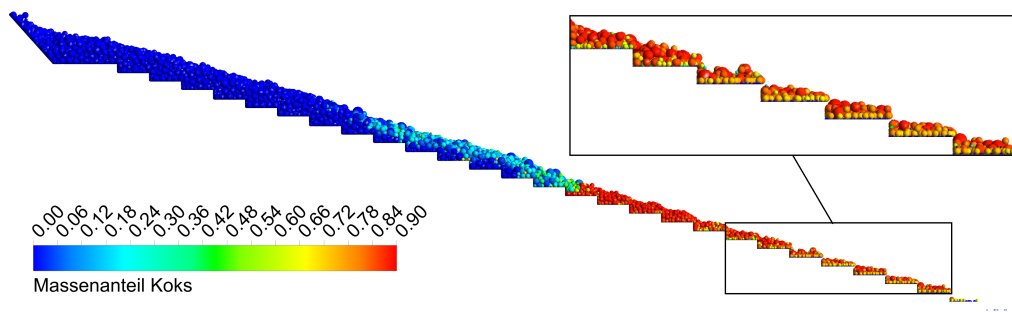


Abb. 7.9: Massenanteil von Koks der im Brennstoffbett befindlichen Partikel

Höher angeordnete Kokspartikel werden aufgrund der Sauerstoffverknappung vorrangig durch Vergasungsreaktionen umgewandelt. Hierbei spielen einerseits das mit der Reziluft (unter Rost) eingebrachte H_2O sowie CO_2 eine Rolle, sowie das aus der am Rost ablaufenden Verbrennungsreaktion hervorgehende CO_2 .

Aus der Sequenz von Aufheizung des Energieträgers, Trocknung und Pyrolyse sowie Koksasbrand resultiert entlang des Rostes eine hohe Temperaturdifferenz. Diese beläuft sich zwischen dem frischen Brennstoff und ausbrennenden Koksteilchen auf mehr als 1400 K, wie Abbildung 7.10 darlegt.

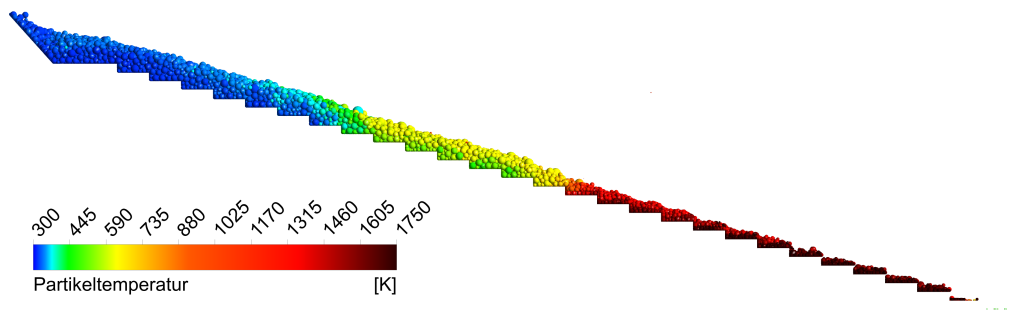


Abb. 7.10: Oberflächentemperatur der im Brennstoffbett befindlichen Partikel

Wie zuvor bereits angedeutet wurde, ergeben sich dort wo Trocknung und Pyrolyse dominieren, bedingt durch einfallende Strahlung, erhöhte Temperaturen auf der Bettoberfläche. An der unteren Seite der Schüttung sind die Temperaturen durch die Wirkung der Primärluft über weite Bereiche geringer. In der Koksabbrandzone kehrt sich dieses Temperaturprofil wegen der Exothermie der Abbaureaktionen um. Kokspartikel mit direkter Nähe zum Rost verzeichnen hier, aufgrund der besseren Sauerstoffverfügbarkeit, die höchsten Temperaturen des gesamten Bettes. Ist der Restkoks auf der Partikeloberfläche weitestgehend abgebaut, klingt die Ausbrandintensität jedoch ab, was zu einer leichten Abnahme des Temperaturniveaus führt. Ebenso sind die Temperaturen auf der Oberseite des Bettes geringer, da anhaltende Sauerstoffknappheit Vergasungsprozesse forciert. Obgleich Temperaturgradienten über die Betthöhe existieren, so sind diese in weiten Bereichen des Bettes deutlich weniger stark ausgeprägt als der Temperaturunterschied entlang des Rostes. Es ist jedoch nicht vollkommen auszuschließen, dass der Temperaturunterschied über die Schüttungshöhe einer Beeinflussung durch das recht grob applizierte Gitter sowie die geringe Anzahl von Paketen entlang der Schichtdicke unterliegt.

Aus der in Abbildung 7.11 dargestellten Biot-Zahl sowie deren Äquivalent für Wärmestrahlung, der Sparrow-Zahl, wird ersichtlich, dass der überwiegende Teil der hier betrachteten Partikel mit Werten von mehr als 0,1 als thermisch dick gilt. Das Aufheizen und Abkühlen der Teilchen sowie der Fortschritt der Umwandlungsprozesse werden neben externem Wärmetransport durch die effektive Wärmeleitung im Inneren der Partikel beeinflusst. Hierauf wurde bereits bei der Beschreibung der Pyrolyse kurz hingedeutet. Nur für sehr kleine und fast vollständig umgewandelte Teilchen wäre die Vernachlässigung partikelinterner Gradienten zulässig und der Einsatz vereinfachter 0D-Modellansätze für thermisch dünne Teilchen gerechtfertigt.

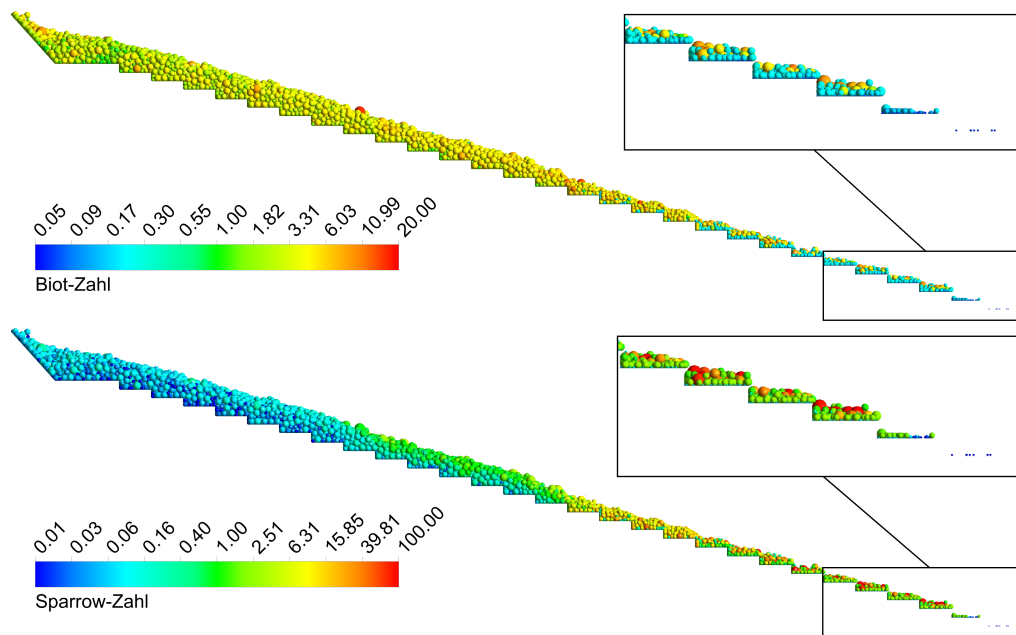


Abb. 7.11: Biot- und Sparrow-Zahl der im Brennstoffbett befindlichen Partikel

Für den Großteil des Holzes spielt das heterogene Temperaturfeld im Inneren jedoch eine zentrale Rolle bei der Verbrennung. Einen Sonderfall bilden in diesem Zusammenhang die größten Brennstoffbestandteile mit Biot-Zahlen von mehr als 10. Hier wird der Fortschritt von Trocknung und Pyrolyse primär durch Wärmetransport innerhalb der Teilchen bestimmt. Die Umwandlungsprozesse bewegen sich in schmalen Reaktionszonen durch die Teilchen. Insgesamt ist daher festzuhalten, dass es aufgrund der heterogenen Partikelfracht und der entsprechenden Umgebungsbedingungen innerhalb der Schüttung zu sehr unterschiedlicher Ausprägung der thermischen Regime kommt. Ein umfassendes Verbrennungsmodell, das internen Wärme- und Stofftransport sowie geeignete Kinetik berücksichtigt, ist somit unerlässlich, um das heterogene Verbrennungsverhalten von Bioenergieträgern adäquat zu beschreiben.

Wegen der langen räumlichen Ausdehnung des Bettes, dem daraus hervorgehenden Abstand frischer und getrockneter Partikel zur Hauptverbrennungszone und den unterschiedlichen Temperaturniveaus der Umwandlungsprozesse entstehen im Inneren der Schüttung Bereiche, in denen jeweils ein thermochemischer Prozess dominiert. Die nachfolgende Abbildung 7.12 verdeutlicht dies anhand der auf der Oberfläche der Teilchen vorherrschenden Konversionsstufe.

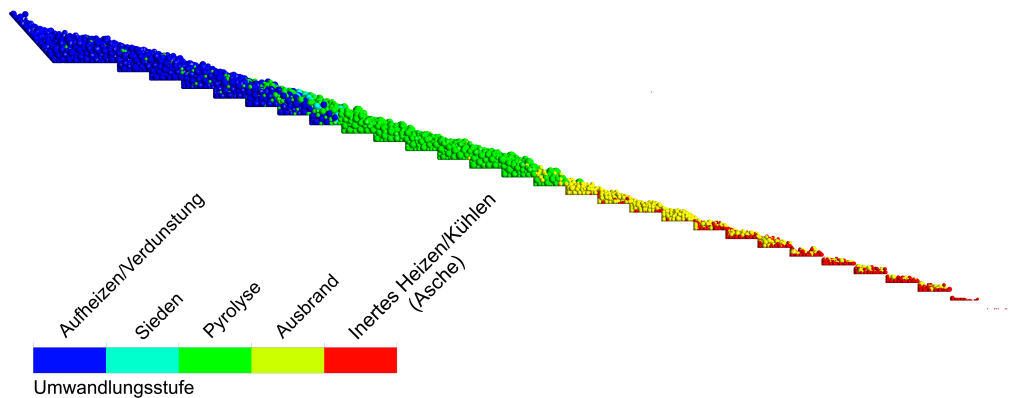


Abb. 7.12: Konversionsstufe auf der Oberfläche der im Brennstoffbett befindlichen Partikel

Aus der Betrachtung des gesamten Brennstoffbettes in Abbildung 7.12 wird außerdem ersichtlich, dass es aufgrund von Schrumpfungsprozessen im Zuge von Pyrolyse und Koksbrand zu einer Abnahme der Betthöhe kommt. Neben der Größenreduktion bedingen die Konversionsprozesse eine rapide Massenabnahme der Brennstoffteilchen, sodass es dort, wo pyrolytische Zersetzung und Koksbrand dominieren, zu einer Ansammlung besonders feiner und leichter Partikel kommt. Dieser Umstand ist für die spätere Betrachtung der Partikelemission und Belagsbildung durch anhaftende Flugascheteilchen von zentraler Bedeutung.

7.4.2 Gasphase

Die Trocknung des Brennstoffbettes führt zur Freisetzung von Wasserdampf, welcher sich im darüber liegenden Gasraum sammelt. Aufgrund der schwachen Gasbewegung ist insbesondere der Brennstoffaufgabeschacht mit austretendem Wasserdampf angereichert. Weiter den Rost abwärts ist zudem eine Strähne mit erhöhter Wasserdampfkonzentration zu beobachten. Hier befindet sich die Haupttrocknungszone, in welcher der Brennstoff aufgrund der einfallenden Freeboardstrahlung beschleunigten Trocknungsvorgängen unterliegt. Abseits dieser Zone ist der Brennstoff trocken. Eine Darstellung der beschriebenen Sachverhalte ist der nachfolgenden Abbildung 7.13 zu entnehmen.

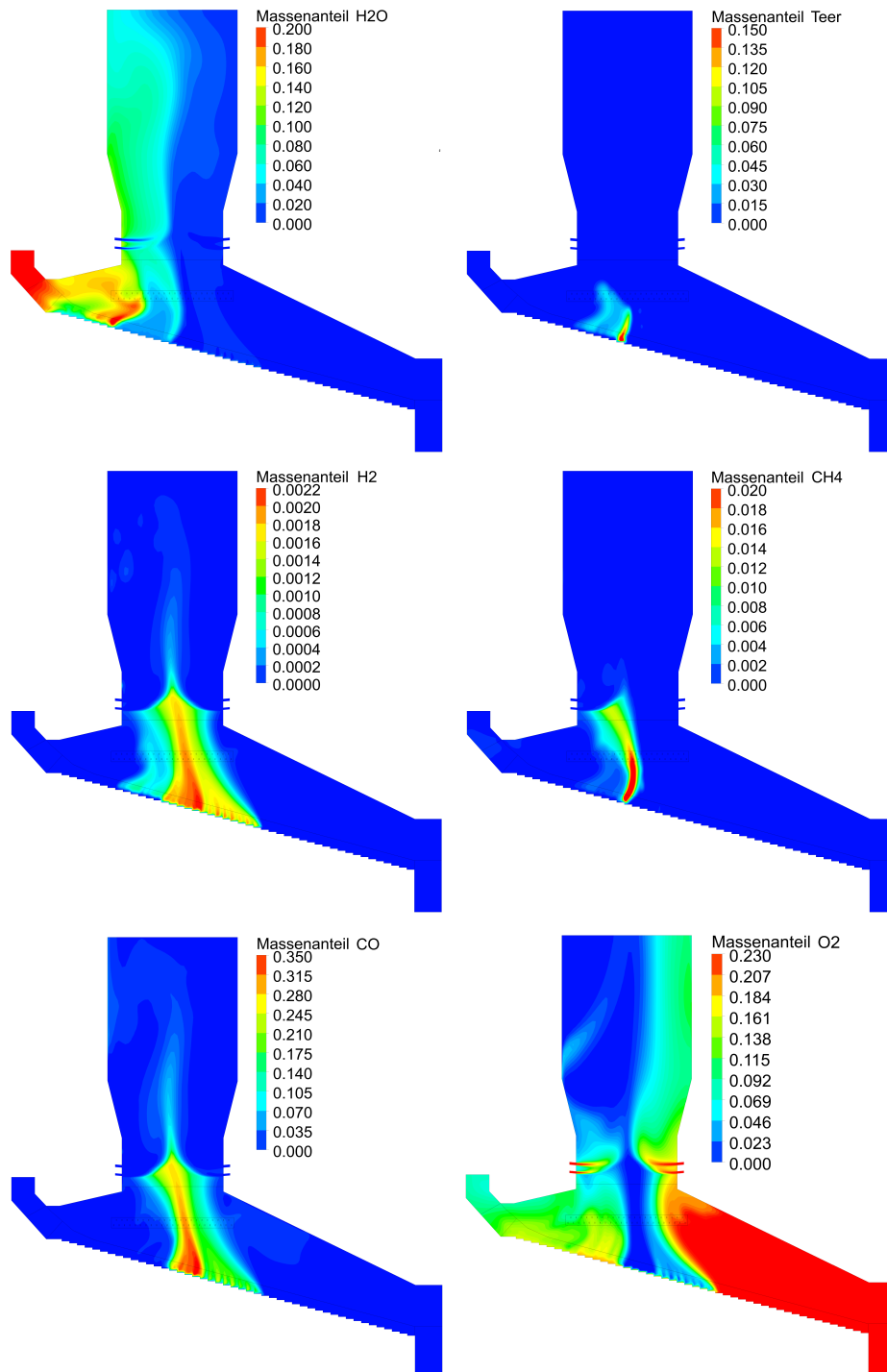


Abb. 7.13: Massenanteile verschiedener Gasspezies im Feuerraum und dem ersten Rauchgaszug der Referenzanlage, dargestellt auf einer Ebene durch die Kesselmitte

Hinter der Trocknungszone nimmt der Wasserdampfanteil in der freien Strömung deutlich ab. Dennoch sind aus Abbildung 7.13 gewisse Dampfmengen oberhalb der Pyrolysezone zu erkennen. Einerseits ist dies auf die Freisetzung von Wasserdampf durch die Primärpyrolyse zurückzuführen, andererseits auf verschiedene Gasphasenreaktionen, die zur Entstehung von Wasserdampf beitragen. Hierbei sind neben der Sekundärpyrolyse die Verbrennungsprozesse von Methan und Wasserstoff aufzuführen. Außerdem wird der Primärluft im Bereich der Pyrolyse und des Koks- ausbrandes ein gewisser Anteil an Rauchgas beigemischt, sodass bereits dadurch Wasserdampf eingetragen wird. Aus Abbildung 7.13 geht weiter hervor, dass im Bereich der Brennstoffpyrolyse hohe Mengen an Teer freigesetzt werden. Bei genauer Betrachtung der Kontur fällt auf, dass dies über weite Bereiche der Pyrolysezone vorwiegend auf der Oberfläche des Bettes geschieht. Das ist durch den zuvor ausgeführten Einfluss der Freeboardstrahlung bedingt. In unmittelbarer Nähe zum Koksabbrand ist der Höhepunkt des Teeranteils zu verzeichnen, da Strahlung aus der Ausbrandzone die Zersetzung der Biopolymere beschleunigt. Grundsätzlich wird der Teer mit geringer Distanz zum Rost vollständig durch sowohl Sekundärpyrolyse als auch die Verbrennungsreaktion abgebaut. Die Anteile von Wasserstoff und Methan besitzen im Bereich der Pyrolysezone einen ähnlichen Verlauf wie der Teer, wobei sich ebenfalls ein Maximum beim Übergang zum Ausbrandbereich abzeichnet. Trotz des verfügbaren Sauerstoffs werden die Gasspezies nicht vollständig in Rostnähe verbrannt, was primär auf das zu geringe Temperaturniveau zurückzuführen ist. Erst bei höheren Gastemperaturen im Bereich der Sekundärlufteinbringung erfolgt eine vollständige Umwandlung der Gasspezies. In Bezug auf Methan ist weiterhin festzustellen, dass sich dessen Anteil durch die Wirkung der Sekundärzersetzung zwischen Rost und Sekundärlufteinbringung erhöht. Hinsichtlich des Wasserstoffs ergeben sich vergleichsweise hohe Massenanteile im Bereich des Koksabbrandes. Ursache hierfür ist der mit der Primärluft eingetragene Wasserdampf und die damit hervorgerufene Vergasung der Kokspartikel. Das Kohlenmonoxid verhält sich im Gasraum oberhalb der Pyrolysezone ähnlich zum Methan. Aufgrund der Abbaureaktionen des Teers kommt es mit zunehmenden Abstand zum Rost zunächst zu einer Erhöhung des Massenanteils, siehe Abb. 7.13. Eine Konversion der Spezies erfolgt erst bei hohen Temperaturen im Bereich der Sekundärlufteinbringung. Insgesamt resultiert der höchste Anteil des Kohlenmonoxids jedoch durch den Koksabbrand, zum einen durch die Vergasung des Materials und zum anderen durch die

Verbrennungsreaktion. Besonders auffällig ist der sehr hohe CO-Anteil im Anfangsbereich der Koksausbrandzone, der sich aus dem Überangebot des Rückstands und den geringen Teilchentemperaturen ergibt. Mit zunehmendem Temperaturniveau im Ausbrand nimmt der CO-Anteil ab. Da der Abbau des Restkokes den verfügbaren Sauerstoff allerdings weitgehend verbraucht, gelangen trotzdem größere Mengen des Gases zur Sekundärluft, wo es bei hohen Temperaturen nahezu vollständig verbrannt wird. Aufgrund der vergleichsweise hohen örtlichen Anteile von Kohlenstoffmonoxid und Wasserstoff erstreckt sich ihre Verbrennung bis weit in den ersten Zug, was dort insgesamt zu einem hohen Temperaturniveau führt. Eine andere Darstellung der beschriebenen Verbrennungsprozesse gibt die nachfolgende Abbildung 7.14 anhand der entsprechenden Reaktionsraten.

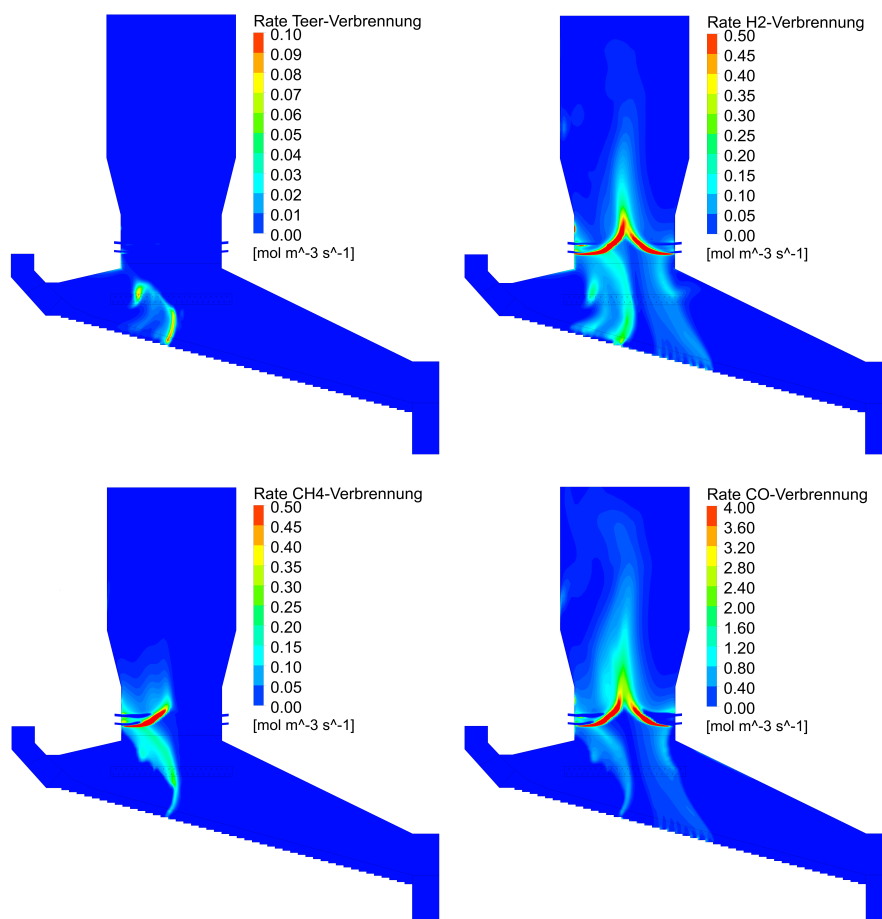


Abb. 7.14: Verbrennungsraten von Teer, Wasserstoff, Methan und Kohlenstoffmonoxid auf einer Ebene durch die Mitte der Referenzanlage

Wie Abbildung 7.15 darlegt, ist die hohe Temperaturdifferenz entlang des Brennstoffbettes ebenso im darüber befindlichen Gasraum zu erkennen. Im Bereich der Brennstofftrocknung ist der Feuerraum vergleichsweise kühl. Mit einer Zunahme der Gasreaktionen infolge der pyrolytischen Zersetzung des Brennstoffs nimmt das Temperaturniveau jedoch zu. In unmittelbarer Nähe zum Rost ergeben sich die höchsten Gastemperaturen durch die exotherme Wirkung der Restkoksreaktionen. Durch anhaltende Verbrennungsprozesse resultieren hier hohe Gastemperaturen, die sich in Richtung der Sekundärluftdüsen fortsetzen. Während der Sekundärverbrennung folgt die Umsetzung eines Großteils der am Rost freigesetzten Gase, da Pyrolyseprodukte, aufgeheizte Gase aus dem Ausbrandbereich und ausreichend Sauerstoff (Sekundärluft) aufeinander treffen. Die dort anhaltenden Verbrennungsprozesse erhitzen das Rauchgas auf Temperaturen von bis zu 2000 K.

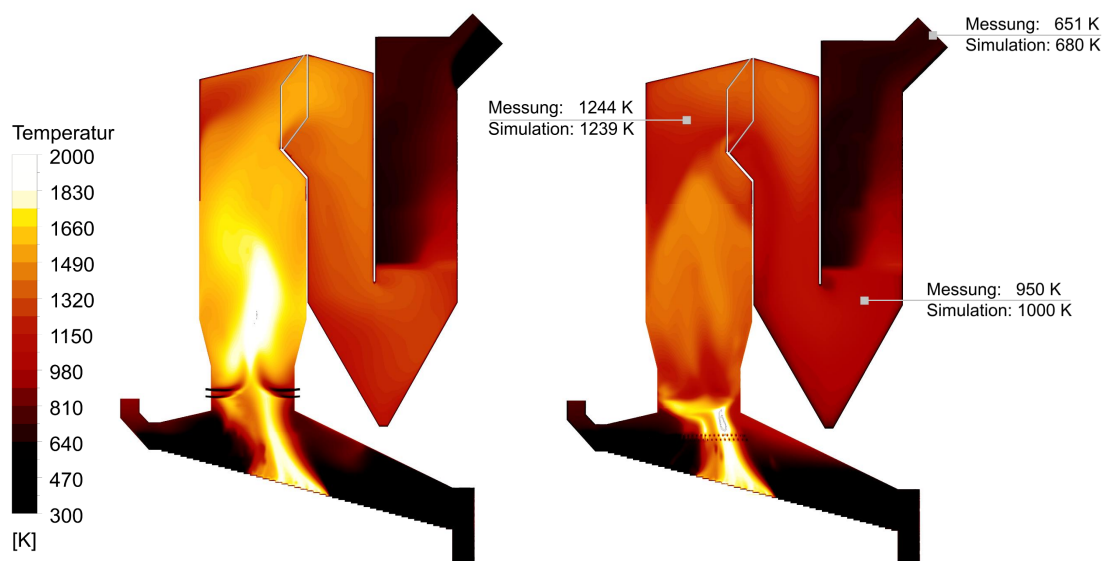


Abb. 7.15: Temperaturfeld im Referenzsystem auf zwei Ebenen: Im Bereich der Kesselmitte (links) und in Nähe zur Kesselwand im Bereich der Temperaturmessfühler mit einem Abgleich zwischen Messung und Simulation (rechts)

Derartige Temperaturwerte sind in Hinblick auf die Entstehung von Ablagerungen als besonders kritisch anzusehen, worauf an späterer Stelle gesondert eingegangen wird. Wegen der weit in den ersten Rauchgaszug hineinreichenden Verbrennung bleibt die Rauchgastemperatur hier weitgehend hoch, kühlt sich im weiteren Verlauf

der Rauchgasbewegung, vorbei an den Heizflächen, über die Rauchgaszüge allerdings immer weiter ab. Neben der Rauchgastemperatur in der Kesselmitte sind in Abbildung 7.15 auch das Temperaturfeld im Bereich der Temperaturmessfühler sowie ein Abgleich zwischen Messung und Rechnung gegeben. Vor dem Hintergrund der Genauigkeit solcher Messsysteme erreicht das Modell eine akzeptable Ergebnisgüte. Eine detaillierte Validierung ist aufgrund der geringen Anzahl von Messwerten jedoch nicht möglich. Insbesondere im Bereich der Primär- und Sekundärverbrennungszone wäre eine weitreichende Datenmenge zur Validierung wünschenswert. Eine umfassendere Datenerhebung auf der Basis einer Messkampagne scheiterte jedoch an der fehlenden Zugänglichkeit des Systems und der Möglichkeit, notwendige Eingriffe vornehmen zu können. Dies ist ein verbreitetes Problem hochautomatisierter Anlagen, weshalb bereits im Vorfeld auf eine umfassende Validierung des Modellkonzeptes Wert gelegt wurde, vgl. Kapitel 6. Der Vergleich des Temperaturfeldes in der Kesselmitte mit den am Rand erfassten Messdaten lässt außerdem erkennen, dass die ausgeführte Temperaturmessung an der Kesseldecke ein schlechter Indikator zur Bewertung der real vorzufinden Verbrennungstemperaturen und der damit zu erwartenden Ablagerungsbelastung ist. Dieser Sachverhalt ist eine mögliche Erklärung dafür, dass massive Belagsbildung erst spät im Verlauf der Reisezeit aus den Messdaten ersichtlich wird.

7.4.3 Partikelflug und Ablagerungsbildung

Bei den aus dem Brennstoffbett an das Rauchgas überführten Teilchen handelt es sich primär um die Feinfraktion des Bioenergieträgers, wobei grundsätzlich alle betrachteten Größenklassen mit einer Ausdehnung von weniger als 5,6 mm bedeutsam sind. In Abbildung 7.16 sind die Partikeltrajektorien der aus dem Brennstoffbett mitgerissenen und im Rauchgas beförderten Partikelfracht dargestellt. Daraus geht hervor, dass der Ursprung der emittierten Teilchen sowohl in der Pyrolyse- als auch der Koksausbrandzone des Rostes liegt. Dass der Partikelflug hier seinen Ursprung findet, liegt in der ungünstigen Kombination aus hoher Primärluftzugabe (siehe Abb. 7.5) und insgesamt leichteren, partiell oder gar vollständig konvertierten, Teilchen begründet. Aufgrund der vergleichsweise hohen Partikelmasse und der moderaten Primärlufteinbringung kommt in der Trocknungszone hingegen kein Partikelflug zustande. Aus Abbildung 7.16 a ist ersichtlich, dass teilweise getrocknete Holzteilchen aus dem Pyrolysebereich des Bettes hervorsteigen, die aufgrund höherer

Temperaturen jedoch im Freeboard schnell zum Restkoks konvertieren. Dieser Sachverhalt betrifft lediglich die feinsten hier betrachteten Teilchen und beschränkt sich daher auf wenige Trajektorien.

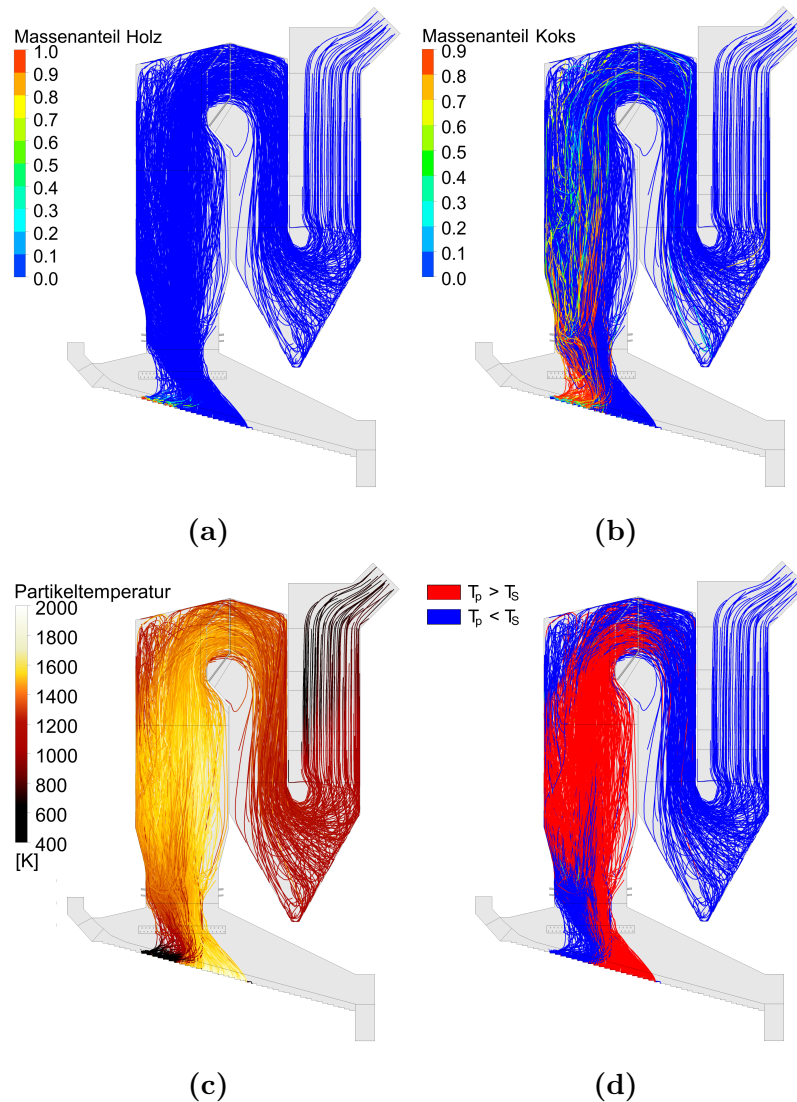


Abb. 7.16: Partikeltrajektorien in der Referenzanlage, eingefärbt über den Massenanteil von Holz (a) und Koks (b) sowie Partikeltemperatur (c) und Partikeltemperatur im Vergleich zur Erweichungstemperatur T_S (d)

Von größerer Bedeutung ist in diesem Zusammenhang der in Abbildung 7.16 b dargestellte Restkoksanteil der Flugpartikel. Während aus der Pyrolysezone neben einigen wenigen Holzpartikeln vorrangig Koksteilchen freigesetzt werden, so emittiert der Ausbrandbereich vorrangig Partikel, deren Restkoks bereits abgebaut

worden ist (Asche). Die Ascheteilchen bewegen sich im Rauchgas ohne weitere Reaktionen zu durchlaufen. Ihre Temperatur wird maßgeblich durch die Fluidtemperatur und das Strahlungsfeld bestimmt. Restkokshaltende Teilchen durchlaufen während ihrer Flugzeit Verbrennungs- und Vergasungsreaktionen, was zum Abbau des Materials führt. Diese Vorgänge beschränken sich auf den Feuerraum, die Sekundärverbrennungszone und sind zum Ende des ersten Rauchgaszuges weitgehend abgeschlossen, wie aus Abbildung 7.16 b ersichtlich wird. Lediglich vereinzelt schaffen Restkoksteilchen den Weg durch das Durchtrittsgitter. Fluid- und Partikeltemperatur sind im ersten Rauchgaszug grundsätzlich hoch genug für beides, Vergasung und Verbrennung des Kokes. Während Kokspartikel bei verfügbarem Sauerstoff verbrennen und Temperaturen jenseits der Rauchgastemperatur erreichen, so vergasen die Teilchen mit Sauerstoffarmut durch das verfügbare H_2O und CO_2 . Diese Teilchen besitzen im Vergleich zum Rauchgas eine geringere Temperatur. Durch die beschriebenen Sachverhalte entstehen bei den Koksteilchen und der umgebenden Gasphase lokale Temperaturdifferenzen von mehreren hundert Kelvin. Insgesamt ergeben sich die höchsten Temperaturwerte der Flugteilchen durch die Emission heißer Partikel aus dem Ausbrandbereich, den Abbrand kokshaltiger Partikel innerhalb der ersten Zuges und die Aufheizung der Partikelfracht aufgrund der Sekundärverbrennung. Dies geht aus der in Abbildung 7.16 c illustrierten Teilchentemperatur hervor. Spätestens beim Durchqueren des ersten Rauchgaszuges erreicht der überwiegende Teil des ablagerungsrelevanten Materials Temperaturen, die oberhalb des Erweichungspunktes angesiedelt sind, siehe Abbildung 7.16 d. Teilchen, welche diese Grenze überschreiten, sind grundsätzlich haftfähig und führen beim Eintritt eines Wandkontaktes zur Entstehung von Belägen. Die Beschaffenheit und Temperatur der Wand spielt hierbei eine untergeordnete Rolle. Von diesem Sachverhalt sind grundsätzlich Teile der Feuerung, die Sekundärverbrennungszone, weitere Bereiche des ersten Rauchgaszuges und das Verdampfergitter betroffen. Mit zunehmender Distanz zur Primär- und Sekundärverbrennung sinkt die Partikeltemperatur in Analogie zum Rauchgas herunter. Für den Großteil der Flugpartikel unterschreitet die Teilchentemperatur den Erweichungspunkt nach Überwindung des Durchtrittsgitters, was die Haftwahrscheinlichkeit eines Partikel-Wand-Kontaktes und das Risiko massiver Belagsbildung erheblich mindert. Gravierende Ablagerungsbildung durch erweichte Flugascheteilchen beschränkt sich somit auf die stromaufwärts liegenden Bereiche des Kessels. In Bezug auf die Emission von Kokspartikeln aus der Py-

rolysezone ist abschließend Folgendes festzuhalten. Solange der Abbau emittierten Restkokes wegen der Abwesenheit von Sauerstoff primär durch Vergasungsreaktionen erfolgt, geht von den Teilchen gegenüber Aschepartikeln kein gesteigertes Potential zur Verschlackungsbildung aus. Dies ändert sich jedoch, wenn das Material unter verfügbarem Sauerstoff umgesetzt wird und Temperaturen oberhalb des Fließpunktes erfährt.

Aus den Ausführungen zum Transport der Flugteilchen lässt sich ableiten, dass massive Belagsbildung als Ergebnis haftfähiger Flugaschepartikel vor allem in den Regionen des Kessels stromaufwärts des Durchtrittsgitters erwartet werden kann. Dies lässt sich durch die Darstellung der Ablagerungsrate an den Wandungen und Heizflächen des Systems in Abbildung 7.17 grundsätzlich bestätigen, wenngleich auch abseits des Gitters eine gewisse Verschmutzung zustande kommt.

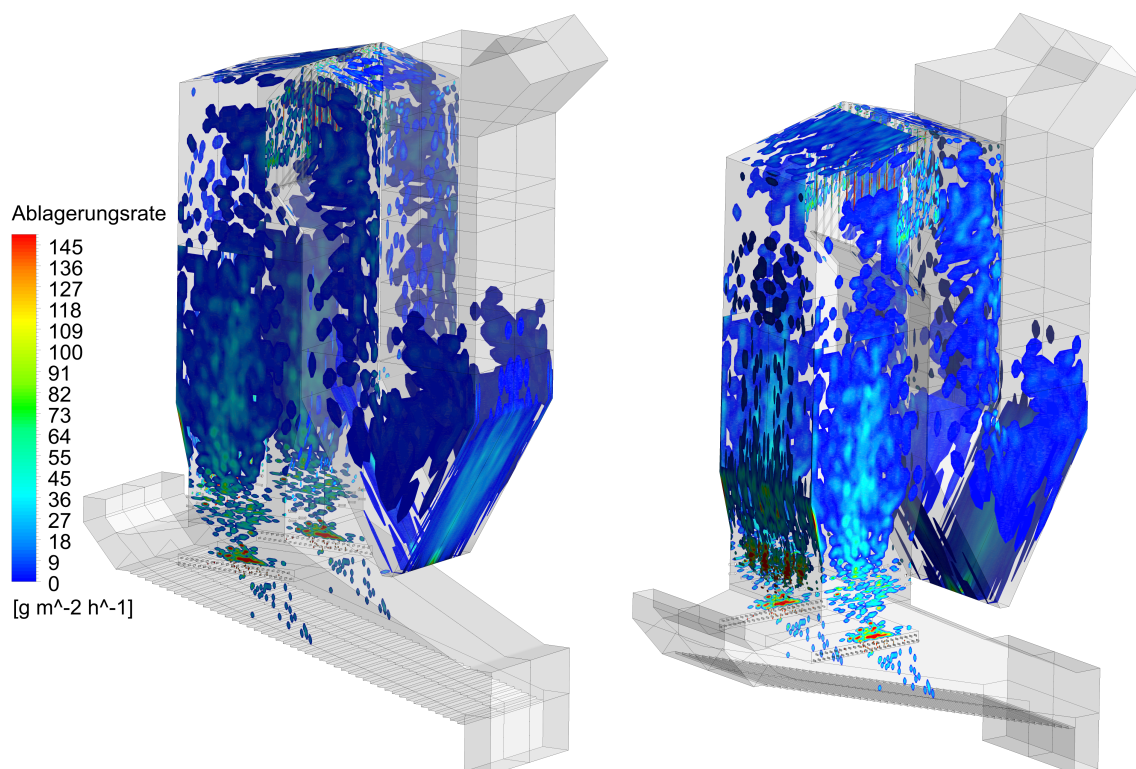


Abb. 7.17: Spezifische Bildungsrate von Ablagerungsstrukturen in der holzhackgutgefeuerten Referenzanlage

Die Anhaftung von Flugasche beginnt bereits im Feuerraum, beschränkt sich allerdings auf die seitlichen Wände innerhalb der Koksausbrandregion. Von hier stammt

der überwiegende Teil der emittierten Partikelfracht, der aufgrund der Verbrennungsprozesse am Rost bereits Teilchentemperaturen oberhalb des Erweichungspunktes aufweist. Dennoch ergeben sich trotz der Haftfähigkeit des transportierten Materials lediglich vereinzelt fleckenartige Beläge. Diese Begebenheit wird durch eine geringe Anzahl von Partikel-Wand-Kontakten, bedingt durch niedrige Turbulenz, hervorgerufen. Dort wo Trocknung und Pyrolyse die Umwandlung des Brennstoffs dominieren, findet hingegen keine Belagsbildung statt, einerseits weil Partikelflug in der Trocknungszone weitgehend ausbleibt, andererseits weil das Temperaturniveau der partiell umgewandelten Teilchen zu gering ist. Durch die Intensivierung der Verbrennung und Erhöhung der Turbulenz aufgrund der eingetragenen Rezi- und Sekundärluft steigt die Belagsbildung in Richtung des ersten Rauchgaszuges an. Insgesamt sind die höchsten Aufbauraten in den Bereichen um die Rezi- und Sekundärluftdüsen zu beobachten. Hier erreicht die Depositionsentstehung Werte von bis zu $150 \text{ g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$. Durch den Eintrag der Gasstrahlen kommt es um die Düsen zur Ausprägung von Rezirkulationsgebieten, in welchen sich die Partikel verfangen und zur Oberfläche der Wände transportiert werden. Infolgedessen kommen haftfähige Partikel und Wände vielfach in Kontakt. Massive Belagsbildung an diesen Stellen ist demnach primär ein strömungsmechanisches Problem. Oberhalb der Sekundärluftdüsen ergeben sich an den Schrägen und vorrangig an den dort vorhandenen Ecken größere Aufbauraten. Im Rest des ersten Zuges folgt bis zum Ende der Ausmauerung ein gleichmäßigerer Aufbau der Depositionsstrukturen. Leicht erhöhte Werte ergeben sich jedoch parallel zur Flamme im Zentrum der seitlichen Ausmauerung. Mit dem Übergang von der Ausmauerung zu den Membranwänden konzentriert sich die Gas- und Partikelbewegung in Richtung des Durchtrittsgitters. Teile der Wandungen und der Kesseldecke sind ebenfalls verschmutzt, wobei die Beläge jedoch deutlich fleckenartiger auftreten. Das Belagsbild verdichtet sich jedoch mit schwindender Distanz zum Verdampfergitter. Da jenes eine direkte Versperrung der Partikelbewegung darstellt, zählt es zu den hochbelasteten Bereichen der Anlage mit Aufbauraten in selber Größenordnung wie an den Düsen. Die Verschmutzung der Rohre beschränkt sich jedoch primär auf die angeströmte Vorderseite. Die Rückseite ist nahezu belagsfrei. Wie zuvor erklärt, nimmt die Haftungsneigung der Partikelfracht hinter dem Gitter deutlich ab, da der Erweichungspunkt der Asche unterschritten wird. An der Kesseldecke und der hinteren Membranwand des zweiten Rauchgaszuges entstehen dennoch leichte Beläge. Dies

begründet sich durch die trägheitsbedingte Einschnürung der Partikelbewegung, eine vergleichsweise hohe Partikelaufrallrate und dem im Ablagerungsmodell eingebetteten Übergangsbereich (Abbildung 5.4). Die gleichen Gesetzmäßigkeiten sorgen auch für die Entstehung von Belägen an der Ascheschnecke und dem Beginn des dritten Rauchgaszuges. Da es hier zur Anlagerung abreagierter Flugascheteilchen mit Temperaturen weit unterhalb des Erweichungspunktes kommt, sind die hiesigen Beläge allerdings vielmehr als Staubschicht zu interpretieren. Mit Eintritt in die Überhitzer bleibt Belagsbildung aufgrund des niedrigen Temperaturniveaus aus, wenngleich aufgrund der Umlenkung eine hohe Aufprallrate vorliegt.

Wie bereits unter Kapitel 4.6 erklärt wurde, ist ein Vergleich zwischen dem errechneten Depositionsaufbau und dem in der Anlage nach einer Reisezeit von 6 Monaten zu beobachtenden Belagsbild grundsätzlich schwierig, da mittels Simulation lediglich eine kurze Zeitspanne eines möglichst bekannten Betriebszustandes abgebildet wird. Dieser ändert sich im Laufe der Reisezeit des Realsystems jedoch wiederholt aufgrund äußerer Anforderungen, wie der angestrebten Energieerzeugung, der Brennstoffqualität und der zunehmenden Einflussnahme der Beläge auf das Systemverhalten gegen Ende der Betriebsdauer. Zudem stellt sich eine Quantifizierung der örtlichen Depositionsausprägung im realen Kessel oft als schwierig dar, weil sich das sichtbare Belagsbild auf mehreren Zentimetern bereits um eine ebenso große Differenz innerhalb der Schichtdicke unterscheidet. Die nachfolgende Tabelle 7.4 stellt daher nur einen groben Vergleich zwischen charakteristischen Wechtenstrukturen und ihrer ungefähren Schichtdicke an einigen Stellen des Realsystems und der berechneten Belagsdicke bereit.

Tab. 7.4: Vergleich von Simulation und Beobachtungen aus dem Referenzsystem anhand der Schichtdicke gravierender Wechtenstrukturen

Position	Errechnete Dicke [mm]	Reale Dicke [mm]
Sekundärluftdüsen	400	300
Ausmauerung 1. Zug	550	400
Durchtrittsgitter	300	150

Die nachfolgende Abbildung 7.18 bietet zudem einen qualitativen Vergleich zwischen der beobachteten Belagsstruktur im Realsystem und der errechneten Depositionsbelastung.

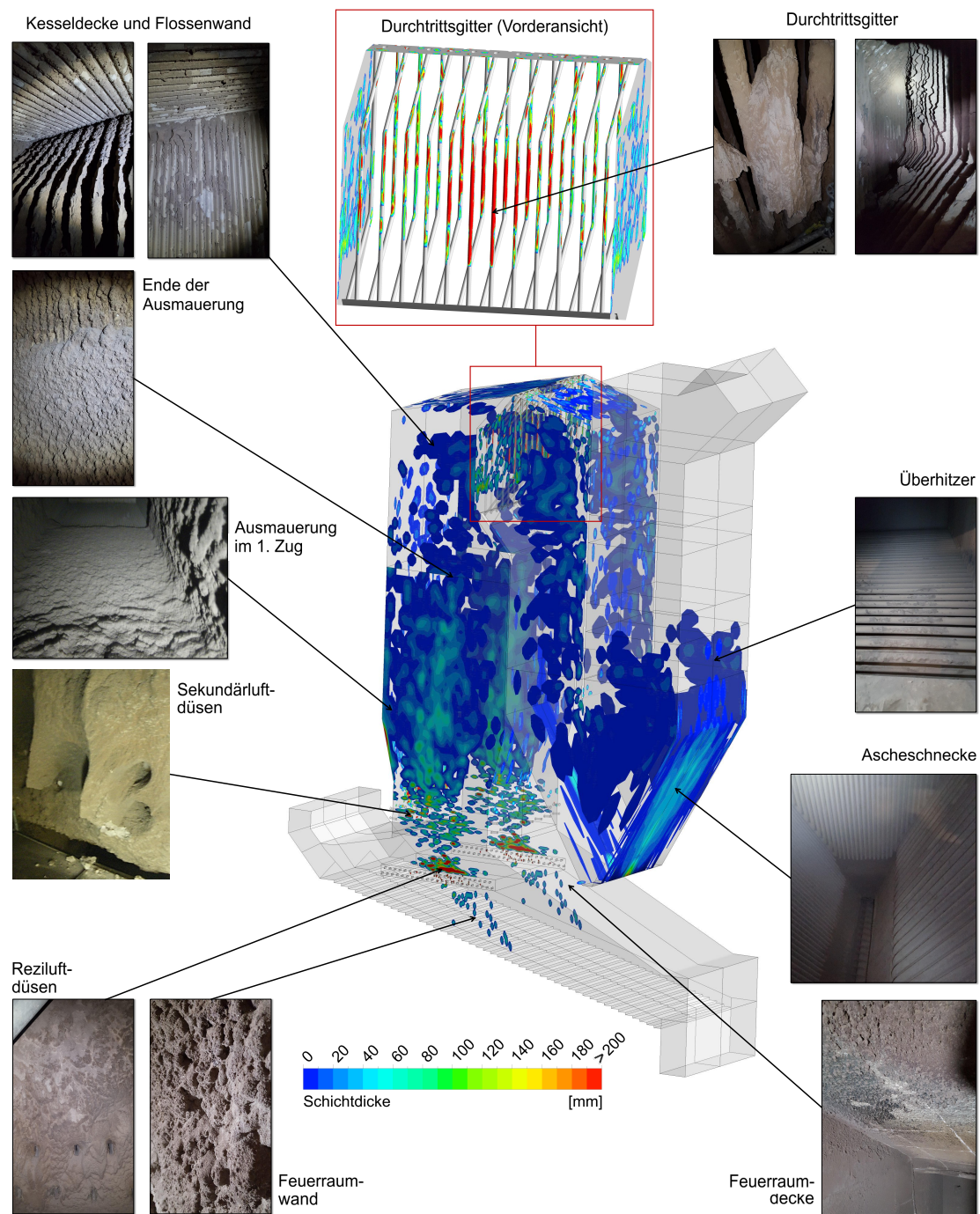


Abb. 7.18: Errechnete Ablagerungsdicke in der Referenzanlage nach einer Betriebszeit von etwa 6 Monaten und Aufnahmen der realen Ablagerungsstruktur nach derselben Betriebsdauer

An den Feuerraumseitenwänden errechnet das Modell fleckenartige Beläge mit einer Schichtdicke im zweistelligen Millimeterbereich. Eine ähnliche Belagsdicke- und -struktur konnte auch im Referenzsystem beobachtet werden, wenngleich die Ablagerungen deutlich weitläufiger ausfielen und sich über die gesamte Breite des Koksaustrandes erstreckten. Im Bereich von Trocknung- und Pyrolyse waren die Seitenwände hingegen kaum von Belägen befallen, was mit den Simulationsergebnissen korreliert. Ebenso waren weite Bereiche der Feuerraumdecke nahezu frei von Ablagerungen. Dies betrifft sowohl den Bereich über der Trocknungs- und Pyrolysezone als auch die Decke am unteren Ende des Rostes. Lediglich am Übergang der Feuerraumdecke zur Sekundärverbrennungszone waren Beläge von einigen zehn Millimetern Dicke zu verzeichnen. Diese werden durch das Modell nicht wiedergegeben. An den Bereichen um die Rauchgasdüsen und den darüber befindlichen Wänden neigt das Modell zu einer Überbestimmung der Schichtdicke. In der Realität betrug die Ausdehnung der Beläge hier deutlich weniger, wahrscheinlich bedingt durch die Entstehung von Schmelzfluss, welcher innerhalb des Depositionsmodells keine Berücksichtigung findet. Dennoch deckt sich der beobachtete Schmelzfluss mit dem in Abbildung 7.15 dargestellten Temperaturfeld und den hier vorhandenen Spitzenwerten. Aus dem Ablagerungsmodell ergeben sich um und oberhalb der Sekundärluftdüsen lokal Bereiche mit einer Schichtdicke von deutlich mehr als 200 mm. Eine derartige Wechtenbildung war auch in der Anlage vorzufinden, siehe Abbildung 7.18. Neben den Düsen besonders stark befallen waren die Schräge darüber und die Eckbereiche der Flossenwände. Die höchste Schichtdicke der gebildeten Beläge konnten hier entdeckt werden und belief sich in den Ecken auf bis zu 400 mm. Auch das Modell kommt an dieser Stelle zu einer ähnlichen Prognose, vgl. Tabelle 7.4. Über die restliche Höhe der Ausmauerung war der Belagsaufbau im Referenzsystem gleichmäßig und betrug einige zehn Millimeter. Das Modell generiert hier ein ähnliches Belagsbild, obgleich es etwas heterogener, respektive fleckenartiger ausfällt. An den Membranwänden und der Kesseldecke des ersten Rauchgaszuges waren nur einzelne Bereiche von Ablagerungen befallen, die eine Schichtdicke von 10-20 mm besaßen. Insbesondere die Depositionen an der Kesseldecke wurden in Richtung des Durchtrittsgitters jedoch deutlich großflächiger, siehe Abbildung 7.18. Auch in dieser Beziehung korrelieren Simulation und Beobachtung gut. Ähnlich stark belastet mit Ablagerungen wie die Bereiche um die Düsen war auch das Durchtrittsgitter der Referenzanlage. Insbesondere an den Rohren in der Kesselmitte war starke Wechtenbildung mit einer Ausdehnung

von bis zu 150 mm zu erkennen. Der obere Teil der Rohre sowie deren gesamte Rückseite waren hingegen mit moderaten Belägen von 10-20 mm Schichtdicke befallen. Grundsätzlich deckt sich die berechnete Belagsstruktur an der Vorderseite des Gitters mit der örtlichen Ausprägung von Wechten. Die Ausdehnung der Strukturen wird durch das Modell allerdings deutlich zu groß prognostiziert, siehe Tabelle 7.4. Die Ursache hierfür liegt vermutlich darin, dass es von Zeit zu Zeit zu einer Ablösung der Wechten kommt, was in der Simulation keine Berücksichtigung findet. Auch in Hinblick auf die Rückseite der Rohre des Gitters ergeben sich Differenzen zwischen Simulation und Beobachtung, da diese Bereiche durch das Modell nahezu frei berechnet werden. Dies mag daran liegen, dass aus der Verbrennungsrechnung lediglich Aschepartikel mit einem Minimaldurchmesser von etwa 50 μm resultieren. Kleinere Teilchen mit mehr Affinität zur Wirbeldiffusion werden nicht betrachtet. Abschließend ist in Bezug auf den Vergleich in Abbildung 7.18 zu erwähnen, dass in Analogie zur Simulation die Ablagerungsbelastung hinter dem Durchtrittsgitter deutlich abnahm. Sowohl die Ascheschnecke als auch die darüber befindlichen Überhitzer waren lediglich mit einer dünnen Staubschicht überzogen.

Neben der Bestimmung der Ablagerungsstruktur erlaubt das Modell auch eine Erklärung der örtlich vorzufindenden Ausprägungsformen. Der Großteil der in der Anlage beobachteten Beläge ist durch zusammengelagerte, grobe Partikel charakterisiert. Deutlicher Schmelzfluss trat nur im Bereich der Rezi- und Sekundärluftdüsen auf. In einigen Bereichen der Ausmauerung sowie am Durchtrittsgitter war zudem oberflächliche Schmelzbildung zu erkennen, wie Abbildung 7.19 darlegt.



Abb. 7.19: Eine vom Durchtrittsgitter abgelöste Wechte mit oberflächlicher Schmelzbildung und Zusammenlagerung einzelner Partikel im Inneren

Die Tatsache, dass der dominierende Anteil der Beläge durch das Zusammenlagern einzelner Flugaschepartikel resultiert, rührt vor allem daher, dass die Aschetemperatur den Erweichungspunkt zwar deutlich überschreitet, in den allermeisten Fällen aber unterhalb des Fließpunktes verbleibt. Die einzelnen Partikel haften aneinander und verkleben, großflächiger Schmelzfluss bleibt so allerdings aus. Dies ändert sich zum Ende der Reisezeit in einigen Bereichen des Kessels, da die schlechte Wärmeabgabe durch vorhandene Beläge hohe Prozesstemperaturen bedingt. Hier sind einige Ausmauerungsbereiche und das Verdampfergitter aufzuführen. Bereiche um die Rezi- und Sekundärluftdüsen sind aufgrund der hohen Temperaturen grundsätzlich von Schmelzfluss befallen.

Das durch die Simulation generierte Belagsbild korreliert insgesamt gut mit den Beobachtungen aus der Referenzanlage. Das Modell erlaubt die Bestimmung gravierender Ablagerungsstrukturen und bietet Erklärungsansätze für die örtliche Ausprägung der Beläge. Insgesamt ist das reale Depositionsbild jedoch weitläufiger und homogener als es die Simulation darstellt. Dies liegt vermutlich an der Zusammenfassung einer zu hohen Anzahl von Partikeln innerhalb eines einzelnen Paketes, was die Bildung von Ablagerungsextrema fördert. Diese Begebenheit ist vor allem einem akzeptablen Partikelzeitschritt für die DEM geschuldet. Es ist davon auszugehen, dass der Gebrauch einer höheren Anzahl feinerer Pakete zu einer gleichmäßigeren Verteilung der Depositionen beiträgt. Ebenso kann der Vernachlässigung feiner Partikel ($\leq 10 \mu\text{m}$) hier eine gewisse Bedeutung beigemessen werden, da diese einem stärkeren Einfluss durch Wirbeldiffusion unterliegen. Der Transport feinerer Partikel aufgrund von Wirbeldiffusion kann insbesondere an den Bereichen um die Düsen und an den Rohren des Durchtrittsgitters zu einem gleichmäßigeren Belagsaufbau führen. Abschließend ist darauf hinzuweisen, dass sich der Verbrennungsschwerpunkt in der realen Anlage über eine Reisezeit von mehreren Monaten vielfach ändert, was ebenfalls einen einheitlicheren Belagsaufbau in vielen Bereichen unterstützt.

7.5 Schlussfolgerungen für den Anlagenbetrieb

Aus der Simulation kann abgeleitet werden, dass der Feinanteil des Brennstoffs die wesentliche Ursache für massive Depositionsbildung in der holzhackgutgefeuerten Referenzanlage darstellt. Die naheliegendste Maßnahme zur Reduktion der Belagsbildung ist eine adäquate Konditionierung des Bioenergieträgers durch eine

Absiebung der feineren Bestandteile ($< 5,6$ mm). Eine Weiterverwertung der abgeschiedenen Fraktionen wäre in anderen Verbrennungssystemen, wie stationären Wirbelschichtfeuerungen, durchaus denkbar. Hier ist aufgrund der erforderlichen Fluidisierung ohnehin eine feinere Körnung Voraussetzung. Neben der Aufbereitung des Brennstoffs kann die Vermeidung von Temperaturspitzen im Bereich der Primär- und Sekundärverbrennungszone helfen, um die Belagsbildung in Rostfeuerungen zu reduzieren. In diesem Kontext kommt der Feuerfestauskleidung eine gesonderte Bedeutung bei. Der innerhalb der Referenzanlage applizierte Feuerfestbeton besitzt eine verhältnismäßig geringe Wärmeleitfähigkeit, was die Ausprägung hoher Verbrennungstemperaturen fördert. Durch den Gebrauch anderer Materialien mit besserer Wärmeleitfähigkeit, wie beispielsweise SiC-Platten kann dem entgegen gewirkt werden. Des Weiteren ist den Simulationsergebnissen zu entnehmen, dass die Temperaturmessung an der Kesseldecke nur bedingt geeignet ist, um die real auftretenden Verbrennungstemperaturen und damit die Verschlackung der Anlage zu bewerten. Die eher lückenhafte Temperaturmessung ist wahrscheinlich ein Hauptgrund dafür, dass sich nennenswerte Anzeichen massiver Belagsstrukturen häufig erst gegen Ende der Reisezeit ergeben. Eine flächendeckendere Messwerterfassung und der Einsatz anderer Messsysteme, wie z. B. Strahlungspyrometer können hilfreich sein, um frühzeitig gravierender Wechtenbildung und der Versperrung von Strömungseinstengungen entgegen zu wirken. Dies setzt jedoch voraus, dass die Fahrweise der Anlagen zumindest in gravierenden Fällen ablagerungsorientiert erfolgt. Die Priorität betreffender Anlagen liegt in erster Instanz jedoch in der Energieproduktion, der Einhaltung von Grenzwerten und einem möglichst effizienten Verbrennungsprozess. Die Entstehung von Belägen und daraus erwachsene Reinigungs- und Instandhaltungskosten sind ein Umstand, welcher sich diesen Anforderungen im Allgemeinen unterordnet. Dennoch deutet die Simulation darauf hin, dass sich großes Potential zur Belagsminderung in der Fahrweise der Anlagen verbirgt. Im hier betrachteten Fall gilt vor allem die hohe Primärluftzugabe im Pyrolyse- und Ausbrandbereich als Ursache des massiven Partikelflugs und damit der Depositionsentstehung. Eine bessere Ausnutzung der gesamten Rostlänge durch eine adaptierte Primärluftvertrimmung und damit geringere Gasgeschwindigkeiten im Brennstoffbett können zur Entschärfung der Ablagerungsproblematik beitragen. Die Erarbeitung einer geeigneten Betriebsstrategie setzt weitere Simulationen voraus und muss unter Betrachtung der Betriebsanforderungen für jede Anlage im Einzelnen erfolgen.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde eine neuartige CFD-DEM-Simulationemethode entwickelt, die zur Analyse der Holzverbrennung und Ablagerungsbildung in einer großtechnischen Rostfeuerung eingesetzt wurde. Grundlage für das neue Verfahren bildet das in ANSYS Fluent enthaltene DDPM. Die diskrete Partikelmethode findet Verwendung, um Bewegung und Verbrennung individueller Brennstoffteilchen zu beschreiben. Der diskreten Phase werden dabei die Prinzipien der DEM zugrunde gelegt, sodass eine Anwendbarkeit auf dichte granulare Systeme, wie Festbetten, besteht. Die Dynamik des granularen Materials wird durch den Gebrauch von Partikelpaketen approximiert. Gegenüber klassischen DEM-Ansätzen führt dieses Vorgehen zu signifikant geringerem Berechnungsaufwand, was eine wesentliche Voraussetzung zur Simulation großer Partikelansammlungen ist. Die thermochemische Konversion des Festbrennstoffs wird durch ein eigens entwickeltes Partikelmodell beschrieben, das sich auf eine eindimensionale Auflösung intrapartikulärer Prozesse stützt und mittels diverser UDFs in ANSYS Fluent eingebettet wurde. Das effiziente 1D-Partikelmodell basiert auf einem reduzierten Satz Bilanzgleichungen und vereint Submodelle für Trocknung, Pyrolyse sowie heterogene Restkoksreaktionen. Die Konversionsprozesse sind mit verschiedenen Stoff- und Wärmetransportmechanismen gekoppelt, woraus eine breite Anwendbarkeit des Modells auf unterschiedliche Teilchengrößen und Umgebungsbedingungen resultiert. Dies ist eine wesentliche Voraussetzung dafür, die Heterogenität typischer Bioenergieträger innerhalb der Simulation adäquat zu berücksichtigen. Zudem ist der limitierte Berechnungsaufwand des neuentwickelten Partikelmodells grundlegend für die Betrachtung großer Teilchenzahlen, wie sie in großtechnischen Anlagen vorkommen.

Anhand von experimentellen Daten aus der Literatur wurde das CFD-DEM-Verfahren umfassend validiert. Um die Tauglichkeit des 1D-Partikelmodells zu überprüfen, erfolgte zunächst die simulative Nachbildung von Einzelpartikelversuchen zur Pyrolyse und Verbrennung von Brennstoffteilchen aus Pappelholz. In diesem Zusammenhang erzielte der Modellansatz sowohl unter inerten Umgebungsbedingungen als auch oxidativer Atmosphäre gute Übereinstimmung mit Messdaten. Dies betrifft sowohl die Verläufe von Kern- und Oberflächentemperatur als auch die Massenab-

nahme der Partikel. Das Konzept agiert zuverlässig unter Betrachtung verschiedener Teilchenabmaße und Wasseranteile. Anschließend erfolgte die Simulation eines Festbettes aus Buchenholzhackschnitzeln, um die gesamtheitliche Funktionstüchtigkeit des Simulationsverfahrens zu verifizieren. Auch in diesem Fall generierte das Verfahren plausible Ergebnisse in guter Übereinstimmung mit Temperaturmessdaten an verschiedenen Stellen der Schüttung sowie deren globaler Massenabnahme.

Das validierte CFD-DEM-Konzept wurde nachfolgend erstmalig für die Simulation einer industriellen Biomasserostfeuerung angewendet, um die Verbrennungsprozesse sowie den Belagsaufbau in Feuerung und Dampferzeuger zu untersuchen. Das Vorgehen wurde dabei um ein Viskositätsmodell zur Berechnung der Haftwahrscheinlichkeit von Flugascheteilchen ergänzt. Die Simulationsergebnisse zeigen insgesamt eine gute Übereinstimmung mit verfügbaren Temperaturmessdaten aus dem Prozessleitsystem der Referenzanlage sowie Beobachtungen des realen Ablagerungsbildes. Das Verfahren ist geeignet, um die Ablagerungsverteilung wiederzugeben und erlaubt zudem die Bestimmung massiver Ablagerungsstrukturen. Ferner bietet das Verfahren Erklärungsansätze für die örtliche Ausprägung von Belagserscheinungsformen. Aus den Ergebnissen der Simulation ließ sich ableiten, dass der Ursprung der für die Belagsbildung verantwortlichen Partikelfracht in der Pyrolyse- und Ausbrandzone des Rostes liegt. Dies ist vor allem auf die Anwesenheit leichter Partikel und insgesamt sehr hohe Primärluftraten zurückzuführen. Darüber hinaus erreicht der überwiegende Anteil des Materials im Verlauf der Primär- und Sekundärverbrennung Teilchentemperaturen weit oberhalb des Erweichungspunktes, was als Ursache der massiven Belagsentstehung anzusehen ist. Dieser Umstand steht einerseits in Verbindung zur Betriebsweise der Anlage, andererseits zur applizierten Auskleidung in der Feuerung und dem ersten Rauchgaszug.

Aus den Untersuchungsergebnissen konnten verschiedene Ansätze zur Entschärfung der Ablagerungsbildung abgeleitet werden. An erster Stelle steht dabei die Absiebung des ablagerungsrelevanten Brennstofffeinanteils, der sich auf Teilchen mit einer Ausdehnung von weniger als 5,6 mm erstreckt. Zudem kann eine ablagerungsorientierte Betriebsstrategie mit einer weiteren Spreizung der Primärluftzugabe und Ausnutzung der gesamten Rostlänge zur Reduktion des Partikelflugs beitragen. Ein Austausch des Feuerfestbetons gegen Materialien mit besserer Wärmeleitfähigkeit kann außerdem helfen, um Temperaturspitzen abzubauen und einer Überschreitung des Ascheerweichungspunktes entgegenzuwirken. Um die Wirksamkeit der identifizierten

Optimierungsansätze zu prüfen, sind umfassende Variationsrechnungen notwendig. Vor allem für eine gedachte Anwendung auf das reale System ist eine Bewertung der Maßnahmen vor dem Hintergrund äußerer Randbedingungen erforderlich. Hierzu zählt vor allem die Gewährleistung der primären Zielstellung einer solchen Anlage, eine möglichst stabile und effiziente Verbrennung zur Erreichung der vorgeschriebenen Energieproduktion und unter Einhaltung von Emissionsvorgaben.

Das vorgestellte Simulationsverfahren ist vielseitig nutzbar, kann auf unterschiedliche Anlagen übertragen werden und ist durch seinen modularen Aufbau erweiterbar. Für die Zukunft ist daher angedacht die Quantifizierung der Belagsdicke zu verbessern. Hierfür sind grundsätzlich verschiedene Maßnahmen denkbar, wie die Berücksichtigung belagsreduzierender Prozesse (z. B. Schmelzflussbildung und Wechtenablösung) oder die Behandlung einer größeren Anzahl feinerer Pakete im Zuge der wachsenden Leistungsfähigkeit verfügbarer Rechentechnik. Außerdem ist denkbar, das bestehende Ablagerungsmodell um Aschedampfkondensation zu erweitern, um Anlagen mit massiver Belagsentstehung an den konvektiven Heizflächen Optimierungsansätze aufzeigen zu können. Abseits der Belagsproblemstellung ist auch die Ausdehnung des CFD-DEM-Verfahrens auf andere Fragestellungen, wie Emissionsberechnung, möglich.

Literaturverzeichnis

- [1] BUNDESGESETZBLATT JAHRGANG 2000 TEIL 1 NR. 13: *Gesetz für den Vorrang Erneuerbarer Energien (Erneuerbare-Energien-Gesetz-EEG) sowie zur Änderung des Energiewirtschaftsgesetzes und des Mineralölsteuergesetzes*, 29. März 2000
- [2] BUNDESGESETZBLATT JAHRGANG 2016 TEIL 1 NR. 49: *Gesetz zur Einführung von Ausschreibungen für Strom aus Erneuerbaren Energien und zu weiteren Änderungen des Rechts der Erneuerbaren Energien*, 13. Oktober 2016
- [3] BIOMASSEVERORDNUNG - BIOMASSEV: *Verordnung über die Erzeugung von Strom aus Biomasse (BGBI. I S. 1234)*, 21. Juni 2001. – zuletzt geändert durch Artikel 8 des Gesetzes vom 13. Oktober 2016 (BGBI. I S. 2258)
- [4] FACHAGENTUR NACHWACHSENDE ROHSTOFFE E.V.: *Basisdaten Bioenergie Deutschland 2018*, 2018. – <http://www.fnr.de>
- [5] WESSELAK, V. ; SCHABBACH, T. ; LINK, T. ; FISCHER, J.: *Handbuch Regenerative Energietechnik*. Springer-Verlag GmbH, 2017
- [6] DEMIRBAS, A.: Products from Lignocellulosic Materials via Degradation Processes. In: *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects* 30 (2008), S. 27–37
- [7] KALTSCHMITT, M. ; HARTMANN, H. ; HOFBAUER, H. (Hrsg.): *Energie aus Biomasse, Grundlagen Techniken und Verfahren*. Springer-Verlag, 2009
- [8] VASSILEV, S. V. ; BAXTER, D. ; ANDERSEN, L. K. ; VASSILEVA, C. G. ; MORGAN, T. J.: An Overview of the Organic and Inorganic Phase Composition of Biomass. In: *Fuel* 94 (2012), S. 1–33
- [9] DEMIRBAS, A.: Biorefineries: Current Activities and Future Developments. In: *Energy Conversion and Management* 50 (2009), S. 2782–2801

-
- [10] GRØNLI, M. G.: *A Theroretical and Experimental Study of the Thermal Degradation of Biomass*, Norwegian University of Science and Technology, Dissertation, 1996
- [11] FOREST PRODUCTS LABORATORY: *Wood Handbook - Wood as an Engineering Material: General Technical Report FPL-GTR-190*. 2010
- [12] LINDBERG, D. ; BACKMAN, R. ; CHARTRAND, P. ; HUPA, M.: Towards a Comprehensive Thermodynamic Database for Ash-Forming Elements in Biomass and Waste Combustion — Current Situation and Future Developments. In: *Fuel Processing Technology* 105 (2013), S. 129–141
- [13] OBERNBERGER, I.: *Ash Related Problems in Biomass Combustion Plants*. Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven, 2005
- [14] VASSILEV, S. V. ; BAXTER, D. ; ANDERSEN, L. K. ; VASSILEVA, C. G.: An Overview of the Chemical Composition of Biomass. In: *Fuel* 89 (2010), S. 913–933
- [15] BAXTER, L. L.: Ash Deposition During Biomass and Coal Combustion: A Mechanistic Approach. In: *Biomass and Bioenergy* 4 (1993), Nr. 2, S. 85–102
- [16] ZEVENHOVEN, M. ; YRJAS, P. ; HUPA, M.: Ash-Forming Matter and Ash-Related Problems. In: *Handbook of Combustion* Bd. 4, WILEY-VCH Verlag GmbH und Co. KGaA, 2010, S. 493–531
- [17] BRUCH, C.: *Beitrag zur Modellierung der Festbettverbrennung in automatischen Holzfeuerungen*, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Dissertation, 2001
- [18] DI BLASI, C.: Combustion and Gasification Rates of Lignocellulosic Chars. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 35 (2009), S. 121–140
- [19] FERNANDO, S. ; ADHIKARI, S. ; CHANDRAPAL, C. ; MURALI, N.: Biorefineries: Current Status, Challenges, and Future Direction. In: *Energy and Fuels* 20 (2006), S. 1727–1737

- [20] STEFANIDIS, S. D. ; KALOGIANNIS, K. G. ; ILIOPOULOU, E. F. ; MICHAILOF, C. M. ; PILAVACHI, P. A. ; LAPPAS, A. A.: A Study of Lignocellulosic Biomass Pyrolysis via the Pyrolysis of Cellulose, Hemicellulose and Lignin. In: *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis* 105 (2014), S. 143–150
- [21] KAN, T. ; STREZOV, V. ; EVANS, T. J.: Lignocellulosic Biomass Pyrolysis: A Review of Product Properties and Effects of Pyrolysis Parameters. In: *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 57 (2016), S. 1126–1140
- [22] MERMOUD, F. ; SALVADOR, S. ; VAN DE STEENE, L. ; GOLFIER, F.: Influence of the Pyrolysis Heating Rate on the Steam Gasification Rate of Large Wood Char Particles. In: *Fuel* 85 (2006), S. 1473–1482
- [23] PETERS, B.: Classification of Combustion Regimes in a Packed Bed of Particles Based on the Relevant Time and Length Scales. In: *Combustion and Flame* 116 (1999), S. 297–301
- [24] DI BLASI, C. ; BUONANNO, F. ; BRANCA, C.: Reactivities of Some Biomass Chars in Air. In: *Carbon* 37 (1999), S. 1227–1238
- [25] BEWS, I. M. ; HAYHURST, A. N. ; RICHARDSON, S. M. ; TAYLOR, S. G.: The Order, Arrhenius Parameters, and Mechanism of the Reaction Between Gaseous Oxygen and Solid Carbon. In: *Combustion and Flame* 124 (2001), S. 231–245
- [26] LINK, S. ; ARVELAKIS, S. ; HUPA, M. ; YRJAS, P. ; KÜLAOTS, I. ; PAIST, A.: Reactivity of the Biomass Chars Originating from Reed, Douglas Fir, and Pine. In: *Energy and Fuels* 24 (2010), S. 6533–6539
- [27] GUIZANI, C. ; JEGUIRIM, M. ; GADIOU, R. ; SANZ, F. J. E. ; SALVADOR, S.: Biomass Char Gasification by H₂O, CO₂ and Their Mixture: Evolution of Chemical, Textural and Structural Properties of the Chars. In: *Energy* 112 (2016), S. 133–145
- [28] VASSILEV, S. V. ; BAXTER, D. ; VASSILEVA, C. G.: An Overview of the Behaviour of Biomass During Combustion: Part I. Phase-Mineral Transformations of Organic and Inorganic Matter. In: *Fuel* 112 (2013), S. 391–449

- [29] NIU, Y. ; TAN, H. ; HUI, S.: Ash-Related Issues During Biomass Combustion: Alkali-Induced Slagging, Silicate Melt-Induced Slagging (Ash Fusion), Agglomeration, Corrosion, Ash Utilization, and Related Countermeasures. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 52 (2016), S. 1–61
- [30] EFFENBERGER, H.: *Dampferzeugung*. Springer-Verlag, 2000
- [31] MUHAMMADIEH, M.: *Beitrag zur Ermittlung des Ansatzbildungspotenzials von Braunkohlen in Dampferzeugern*, Technische Universität Bergakademie Freiberg, Dissertation, 2007
- [32] KARL, J.: *Dezentrale Energiesysteme: Neue Technologien im liberalisierten Energiemarkt*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH, 2012
- [33] NARODOSLAWSKY, M. ; OBERNBERGER, I.: From Waste to Raw Material - The Route from Biomass to Wood Ash for Cadmium and Other Heavy Metals. In: *Journal of Hazardous Materials* 50 (1996), S. 157–168
- [34] BAXTER, L. L.: *Ash Deposit Formation and Deposit Properties: A Comprehensive Summary of Research Conducted at Sandia's Combustion Research Facility (Research Report: SAND2000-8253)*. Sandia National Laboratories, 2000
- [35] SIPPULA, O.: *Fine Particle Formation and Emissions in Biomass Combustion*, University of Eastern Finland, Diss., 2010
- [36] CHRISTENSEN, K. A. ; LIVBJERG, H.: A Field Study of Submicron Particles from the Combustion of Straw. In: *Aerosol Science and Technology* 25 (1996), S. 185–199
- [37] VALMARI, T. ; LIND, T. M. ; KAUPPINEN, E. I.: Field Study on Ash Behavior during Circulating Fluidized-Bed Combustion of Biomass. 2. Ash Deposition and Alkali Vapor Condensation. In: *Energy and Fuels* 13 (1999), S. 390–395
- [38] JIMÉNEZ, S. ; BALLESTER, J.: Influence of Operating Conditions and the Role of Sulfur in the Formation of Aerosols from Biomass Combustion. In: *Combustion and Flame* 140 (2005), S. 346–358

-
- [39] LIND, T. ; VALMARI, T. ; KAUPINNEN, E. ; NILSSON, K. ; SFIRIS, G. ; MAENHAUT, W.: Volatilization of the Heavy Metals during Circulating Fluidized Bed Combustion of Forest Residue. In: *Environmental Science and Technology* 33 (1999), S. 496–502
- [40] LIND, T. ; VALMARI, T. ; KAUPINNEN, E. ; NILSSON, K. ; SFIRIS, G. ; MAENHAUT, W.: Ash Formation Mechanisms during Combustion of Wood in Circulating Fluidized Beds. In: *Proceedings of the combustion Institute* 28 (2000), S. 2287–2295
- [41] OBERNBERGER, I. ; FLUCH, J. ; BRUNNER, T.: Comparative Characterisation of High Temperature Aerosols in Waste Wood Fired Fixed-Bed and Fluidised-Bed Combustion Systems. In: *Proceedings of the 17th European Biomass Conference* (2009), S. 1189–1199
- [42] WEBER, R. ; SCHAFFEL-MANCINI, N. ; MANCINI, M. ; KUPKA, T.: Fly Ash Deposition Modelling: Requirements for Accurate Predictions of Particle Impaction on Tubes using RANS-based Computational Fluid Dynamics. In: *Fuel* 108 (2013), S. 586–596
- [43] WEBER, R. ; MANCINI, M. ; SCHAFFEL-MANCINI, N. ; KUPKA, T.: On Predicting the Ash Behaviour using Computational Fluid Dynamics. In: *Fuel Processing Technology* 105 (2013), S. 113–128
- [44] TOMECZEK, J. ; WACŁAWIAK, K.: Two-Dimensional Modelling of Deposits Formation on Platen Superheaters in Pulverized Coal Boilers. In: *Fuel* 88 (2009), S. 1466–1471
- [45] DIN CEN/TS 15370-1:2006-12: *Feste Biobrennstoffe - Verfahren zur Bestimmung des Schmelzverhaltens der Asche - Teil 1: Verfahren zur Bestimmung charakteristischer Temperaturen*. 2006
- [46] WANG, L. ; HUSTAD, J. E. ; SKREIBERG, Ø. ; SKJEVRAK, G. ; GRØNLI, M.: A Critical Review on Additives to Reduce Ash Related Operation Problems in Biomass Combustion Applications. In: *Energy Procedia* 20 (2012), S. 20–29
- [47] MUIZNIECE, I. ; KLAVINA, K.: Logging Residue Fuel Characteristic Ash Melting Temperatures. In: *Energy Procedia* 95 (2016), S. 314–318

-
- [48] NIU, Y. ; ZHU, Y. ; TAN, H. ; HUI, S. ; JING, Z. ; XU, W.: Investigations on Biomass Slagging in Utility Boiler: Criterion Numbers and Lagging Growth Mechanisms. In: *Fuel Processing Technology* 128 (2014), S. 499–508
- [49] JIN, X. ; YE, J. ; DENG, L. ; CHE, D.: Condensation Behaviors of Potassium during Biomass Combustion. In: *Energy and Fuels* 31 (2017), S. 2951–2958
- [50] KLEINHANS, U. ; RÜCK, R. ; SCHMID, S. ; HASELSTEINER, T. ; SPLIETHOFF, H.: Alkali Vapor Condensation on Heat Exchanging Surfaces: Laboratory-Scale Experiments and a Mechanistic CFD Modeling Approach. In: *Energy and Fuels* 30 (2016), S. 9793–9800
- [51] NIELSEN, H. P. ; FRANDSEN, F. J. ; DAM-JOHANSEN, K. ; BAXTER, L. L.: The Implications of Chlorine-Associated Corrosion on the Operation of Biomass-Fired Boilers. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 26 (2000), S. 283–298
- [52] MICHELSEN, H. P. ; FRANDSEN, F. ; DAM-JOHANSEN, K. ; LARSEN, O. H.: Deposition and High Temperature Corrosion in a 10 MW Straw Fired Boiler. In: *Fuel Processing Technology* 54 (1998), S. 95–108
- [53] SKRIFVARS, B.-J. ; BACKMAN, R. ; HUPA, M. ; SALMENOJA, K. ; VAKKILAINEN, E.: Corrosion of Superheater Steel Materials under Alkali Salt Deposits Part 1: The Effect of Salt Deposit Composition and Temperature. In: *Corrosion Science* 50 (2008), S. 1274–1282
- [54] SWITENBANK, J. ; YANG, Y. B. ; RYU, C. ; GOODFELLOW, J. ; SHABANGU, S. ; RUSSELL, N. V. ; LEWIS, F. M. ; SHARIFI, V. N.: Biomass Combustion. In: *European Combustion Meeting (ECM2003) Plenary Lecture* (2003), S. 1–18
- [55] YANG, Y. B. ; NEWMAN, R. ; SHARIFI, V. ; SWITENBANK, J. ; ARISS, J.: Mathematical Modelling of Straw Combustion in a 38 MWe Power Plant Furnace and Effect of Operating Conditions. In: *Fuel* 86 (2007), S. 129–142
- [56] YIN, C. ; ROSENDAHL, L. ; KÆR, S. K. ; CLAUSEN, S. ; HVID, S. L. ; HILLE, T.: Mathematical Modeling and Experimental Study of Biomass Combustion in a Thermal 108 MW Grate-Fired Boiler. In: *Energy and Fuels* 22 (2008), S. 1380–1390

- [57] YU, Z. ; MA, X. ; LIAO, Y.: Mathematical Modeling of Combustion in a Grate-Fired Boiler Burning Straw and Effect of Operating Conditions under Air- and Oxygen-Enriched Atmospheres. In: *Renewable Energy* 35 (2010), S. 895–903
- [58] SCHARLER, R. ; FORSTNER, M. ; BRAUN, M. ; BRUNNER, T. ; OBERNBERGER, I.: Advanced CFD Analysis of Large Fixed Bed Biomass Boilers with Special Focus on the Convective Section. In: *2nd World Conference and Exhibition on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection*, 2004
- [59] SCHULZE, K. ; HOFMEISTER, G. ; JOELLER, M. ; SCHARLER, R. ; OBERNBERGER, I. ; KORBEE, R. ; CIEPLIK, M.: Development and Evaluation of a Flexible Model for CFD Simulation of Ash Deposit Formation in Biomass Fired Boilers. In: *Impacts of Fuel Quality on Power Production*, 2007
- [60] SCHULZE, K. ; SCHARLER, R. ; OBERNBERGER, I.: Development of an Advanced CFD Model for Ash Deposit and Aerosol Formation in Biomass Fired Boilers. In: *9th European Conference on Furnaces and Boilers*, 2011
- [61] SHIEHNEJADHESAR, A. ; MEHRABIAN, R. ; SCHARLER, R. ; OBERNBERGER, I.: Development of a Streak Formation Model for an Improved Prediction of Gas Phase Combustion in Biomass Grate Furnaces. In: *10th European Conference on Furnaces and Boilers*, 2015
- [62] KÆR, S. K.: Numerical Modelling of a Straw-Fired Grate Boiler. In: *Fuel* 83 (2004), S. 1183–1190
- [63] KÆR, S. K.: Straw Combustion on Slow-Moving Grates — A Comparison of Model Predictions with Experimental Data. In: *Biomass and Bioenergy* 28 (2005), S. 307–320
- [64] KÆR, S. K. ; ROSENDAHL, L. A. ; BAXTER, L. L.: Towards a CFD-Based Mechanistic Deposit Formation Model for Straw-Fired Boilers. In: *Fuel* 85 (2006), S. 833–848
- [65] TU, Y. ; ZHOU, A. ; XU, M. ; YANG, W. ; SIAH, K. B. ; PRABAKARAN, S.: Experimental and Numerical Study on the Combustion of a 32 MW Wood-Chip Grate Boiler with Internal Flue Gas Recirculation Technology. In: *Energy Procedia* 143 (2017), S. 591–598

- [66] RÜCKERT, F. U.: *Simulation von Festbettreaktoren zur technischen Verbrennung mit der Euler/Euler-Methode*, Universität Stuttgart, Dissertation, 2005
- [67] KURZ, D. ; SCHNELL, U. ; SCHEFFKNECHT, G.: CFD Simulation of Wood Chip Combustion on a Grate using an Euler–Euler Approach. In: *Combustion Theory and Modelling* 16 (2012), Nr. 2, S. 251–273
- [68] JOHANSSON, R. ; THUNMAN, H. ; LECKNER, B.: Influence of Intraparticle Gradients in Modeling of Fixed Bed Combustion. In: *Combustion and Flame* 149 (2007), S. 49–62
- [69] HERMANSSON, S. ; THUNMAN, H.: CFD Modelling of Bed Shrinkage and Channelling in Fixed-Bed Combustion. In: *Combustion and Flame* 158 (2011), S. 988–999
- [70] DUFFY, Neil: *Investigation of Biomass Combustion in Grate Furnaces using CFD*, National University of Ireland, Dissertation, 2012
- [71] DUFFY, N. T. M. ; EATON, J. A.: Investigation of Factors Affecting Channelling in Fixed-Bed Solid Fuel Combustion using CFD. In: *Combustion and Flame* 160 (2013), S. 2204–2220
- [72] COLLAZO, J. ; PORTEIRO, J. ; PATIÑO, D. ; GRANADA, E.: Numerical Modeling of the Combustion of Densified Wood Under Fixed-Bed Conditions. In: *Fuel* 93 (2012), S. 149–159
- [73] GÓMEZ, M. A. ; PORTEIRO, J. ; PATIÑO, D. ; MÍGUEZ, J. L.: CFD Modelling of Thermal Conversion and Packed Bed Compaction in Biomass Combustion. In: *Fuel* 117 (2001), S. 716–732
- [74] GÓMEZ, M. A. ; PORTEIRO, J. ; PATIÑO, D. ; MÍGUEZ, J. L.: Fast-Solving Thermally Thick Model of Biomass Particles embedded in a CFD Code for the Simulation of Fixed-Bed Burners. In: *Energy Conversion and Management* 105 (2015), S. 30–44
- [75] GÓMEZ, M. A. ; PORTEIRO, J. ; PATIÑO, D. ; MÍGUEZ, J. L.: Eulerian CFD Modelling for Biomass Combustion. Transient Simulation of an Underfeed Pellet Boiler. In: *Energy Conversion and Management* 101 (2015), S. 666–680

- [76] EPPLE, B. ; LEITHNER, R. ; LINZER, W. ; WALTER, H. (Hrsg.): *Simulation von Kraftwerken und Feuerungen*. 2. Auflage. Springer-Verlag, 2012
- [77] CUNDALL, P. A. ; STRACK, O. D. L.: A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies. In: *Gèotechnique* 29 (1979), Nr. 1, S. 47–65
- [78] PETERS, B. ; DŽIUGYS, A. ; NAVAKAS, R.: A Discrete Approach to Thermal Conversion of Solid Fuel by the discrete Particle Method (DPM). In: *10th International Conference on Modern Building Materials, Structures and Techniques*, 2010
- [79] PETERS, B. ; DŽIUGYS, A. ; ; NAVAKAS, R.: Simulation of Thermal Conversion of Solid Fuel by the Discrete Particle Method. In: *Lithuanian Journal of Physics* 51 (2011), Nr. 2, S. 91–105
- [80] MAHMOUDI, A. H. ; HOFFMANN, F. ; PETERS, B.: Application of XDEM as a Novel Approach to Predict Drying of a Packed Bed. In: *International Journal of Thermal Sciences* 75 (2014), S. 65–75
- [81] MAHMOUDI, A. H. ; HOFFMANN, F. ; PETERS, B.: Detailed Numerical Modeling of Pyrolysis in a Heterogeneous Packed Bed using XDEM. In: *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis* 106 (2014), S. 9–20
- [82] MAHMOUDI, A. H. ; HOFFMANN, F. ; MARKOVIC, M. ; PETERS, B. ; BREM, G.: Numerical Modeling of Self-Heating and Self-Ignition in a Packed-Bed of Biomass using XDEM. In: *Combustion and Flame* 163 (2016), S. 358–369
- [83] MAHMOUDI, A. H. ; MARKOVIC, M. ; PETERS, B. ; BREM, G.: An Experimental and Numerical Study of Wood Combustion in a Fixed Bed using Euler–Lagrange Approach (XDEM). In: *Fuel* 150 (2015), S. 573–582
- [84] MAHMOUDI, A. H. ; BESSERON, X. ; HOFFMANN, F. ; MARKOVIC, M. ; PETERS, B.: Modeling of the Biomass Combustion on a Forward Acting Grate using XDEM. In: *Chemical Engineering Science* 142 (2016), S. 32–41
- [85] SIMSEK, E. ; BROSCHE, B. ; WIRTZ, S. ; SCHERER, V. ; KRÜLL, F.: Numerical Simulation of Grate Firing Systems using a Coupled CFD/Discrete Element Method (DEM). In: *Powder Technology* 139 (2009), S. 266–273

- [86] WALDNER, M. H. ; HALTER, R. ; SIGG, A. ; BROSCHE, B. ; GEHRMANN, H. J. ; KEUNECKE, M.: Energy from Waste – Clean, Efficient, Renewable: Transitions in Combustion Efficiency and NO_x control. In: *Waste Management* 33 (2012), Nr. 2, S. 317–326
- [87] BROSCHE, B. ; SCHERER, V. ; WIRTZ, S.: Simulation of Municipal Solid Waste Incineration in Grate Firing Systems with a Particle Based Novel Discrete Element Method. In: *VGB Powertech* 1 (2014), Nr. 2, S. 75–83
- [88] WISSING, F. ; WIRTZ, S. ; SCHERER, V.: Simulating Municipal Solid Waste Incineration with a DEM/CFD Method – Influences of Waste Properties, Grate and Furnace Design. In: *Fuel* 206 (2017), S. 638–656
- [89] MEHRABIAN, R. ; ZAHIROVIC, S. ; SCHARLER, R. ; OBERNBERGER, I. ; KLE-DITZSCH, S. ; WIRTZ, S. ; SCHERER, V. ; LU, H. ; BAXTER, L. L.: A CFD Model for Thermal Conversion of Thermally Thick Biomass Particles. In: *Fuel Processing Technology* 95 (2012), S. 96–108
- [90] MEHRABIAN, R. ; STANGL, S. ; SCHARLER, R. ; OBERNBERGER, I. ; WEISSINGER, A.: CFD Simulation of Biomass Grate Furnaces with a Comprehensive 3D Packed Bed Model. In: *Proceedings of the 25th German Flame Day* (2011)
- [91] MEHRABIAN, R. ; SHIENEJADHESAR, A. ; SCHARLER, R. ; OBERNBERGER, I.: Multi-physics Modelling of Packed Bed Biomass Combustion. In: *Fuel* 122 (2014), S. 164–178
- [92] MEHRABIAN, R. ; SHIENEJADHESAR, A. ; SCHARLER, R. ; OBERNBERGER, I.: Numerical Modelling of Biomass Grate Furnaces with a Particle Based Model. In: *10th European Conference on Industrial Furnaces and Boilers*, 2015
- [93] DZIUGYS, A. ; PETERS, B.: An Approach to Simulate the Motion of Spherical and Non-Spherical Fuel Particles in Combustion Chambers. In: *Granular Matter* 3 (2001), Nr. 2, S. 231–265
- [94] HÖHNER, D. ; WIRTZ, S. ; KRUGGEL-EMDEN, H. ; SCHERER, V.: Comparison of the Multi-Sphere and Polyhedral Approach to Simulate Non-Spherical Particles within the Discrete Element Method: Influence on Temporal Force Evolution for Multiple Contacts. In: *Powder Technology* 208 (2011), S. 643–656

- [95] HÖHNER, D. ; WIRTZ, S. ; SCHERER, V.: A Study on the Influence of Particle Shape on the Mechanical Interactions of Granular Media in a Hopper using the Discrete Element Method. In: *Powder Technology* 278 (2015), S. 286–305
- [96] WIESE, J. ; WISSING, F. ; HÖHNER, D. ; WIRTZ, S. ; SCHERER, V. ; LEY, U. ; BEHR, H. M.: DEM/CFD Modeling of the Fuel Conversion in a Pellet Stove. In: *Fuel Processing Technology* 152 (2016), S. 223–239
- [97] MOHSENI, M. ; PETERS, B. ; BANIASADI, M.: Conversion Analysis of a Cylindrical Biomass Particle with a DEM-CFD Coupling Approach. In: *Case Studies in Thermal Engineering* 10 (2017), S. 343–356
- [98] OEVERMANN, M. ; GERBER, S. ; BEHRENDT, F.: Euler–Lagrange/DEM Simulation of Wood Gasification in a Bubbling Fluidized Bed Reactor. In: *Particuology* 7 (2009), S. 307–316
- [99] GERBER, S.: *Grobstruktursimulation der Biomassevergasung in einer Wirbelschicht am Beispiel von Holz*, Technische Universität Berlin, Dissertation, 2012
- [100] KU, X. ; LI, T. ; LØVÅS, T.: CFD–DEM Simulation of Biomass Gasification with Steam in a Fluidized Bed Reactor. In: *Chemical Engineering Science* 122 (2015), S. 270–283
- [101] ALOBAID, F.: *3D Modelling and Simulation of Reactive Fluidized Beds for Conversion of Biomass with Discrete Element Method*, Technische Universität Darmstadt, Dissertation, 2013
- [102] THUNMAN, H. ; LECKNER, B. ; NIKLASSON, F. ; JOHNSON, F.: Combustion of Wood Particles — A Particle Model for Eulerian Calculations. In: *Combustion and Flame* 129 (2002), S. 30–46
- [103] PORTEIRO, J. ; MIGUEZ, J. L. ; GRANADA, E. ; MORAN, J. C.: Mathematical Modelling of the Combustion of a Single Wood Particle. In: *Fuel Processing Technology* 87 (2006), S. 169–175
- [104] PORTEIRO, J. ; GRANADA, E. ; COLLAZO, J. ; PATIÑO, D. ; MORÁN, J. C.: A Model for the Combustion of Large Particles of Densified Wood. In: *Energy and Fuels* 21 (2007), S. 3151–3159

- [105] STRÖM, H. ; THUNMAN, H.: CFD Simulations of Biofuel Bed Conversion: A Submodel for the Drying and Devolatilization of Thermally Thick Wood Particles. In: *Combustion and Flame* 160 (2013), S. 417–431
- [106] GÓMEZ-BAREA, A. ; LECKNER, B. ; VILLANUEVA PERALES, A. L. ; CAMPOY, M.: Analytical Solutions of Sharp Interface Models with Nth Order Kinetics. Application to Char Conversion. In: *Chemical Engineering Journal* 183 (2012), S. 408–421
- [107] LU, H.: *Experimental and Modeling Investigations of Biomass Particle Combustion*, Brigham Young University, Dissertation, 2006
- [108] LU, H. ; ROBERT, W. ; PEIRCE, G. ; RIPA, B. ; BAXTER, L. L.: Comprehensive Study of Biomass Particle Combustion. In: *Energy and Fuels* 22 (2008), S. 2826–2839
- [109] HASELI, Y. ; VAN OIJEN, J. A. ; DE GOEY, L. P. H.: A Detailed One-Dimensional Model of Combustion of a Woody Biomass Particle. In: *Bio-resource Technology* 102 (2011), S. 9772–9782
- [110] LI, J. ; PAUL, M. C. ; YOUNGER, P. L. ; WATSON, I. ; HOSSAIN, M. ; WELCH, S.: Prediction of High-Temperature Rapid Combustion Behaviour of Woody Biomass Particle. In: *Fuel* 165 (2016), S. 205–214
- [111] YANG, Y. B. ; SHARIFI, V. N. ; SWITENBANK, J. ; MA, L. ; DARVELL, L. I. ; JONES, J. M. ; POURKASHANIAN, M. ; WILLIAMS, A.: Combustion of a Single Particle of Biomass. In: *Energy and Fuels* 22 (2008), S. 306–316
- [112] FAN, J. R. ; ZHA, X. D. ; SUN, P. ; CEN, K. F.: Simulation of Ash Deposit in a Pulverized Coal-Fired Boiler. In: *Fuel* 80 (2001), S. 645–654
- [113] MA, Z. ; IMAN, F. ; LU, P. ; SEARS, R. ; KONG, L. ; ROKANUZZAMAN, A. S. ; MC COLLOR, D. P. ; BENSON, S. A.: A Comprehensive Slagging and Fouling Prediction Tool for Coal-Fired Boilers and its Validation/Application. In: *Fuel Processing Technology* 88 (2007), S. 1035–1043

- [114] MAGDA, A. ; MAGDA, S. I. ; STRELOW, M. ; MÜLLER, H. ; LEITHNER, R.: CFD Modelling of Ash Deposits in Coal Fired Power Plants. In: *Proceedings of International Conference of Heat Exchanger Fouling and Cleaning*. Kreta (Griechenland), 2011, S. 301–308
- [115] DEGEREJI, M. U. ; INGHAM, D. B. ; MA, L. ; POURKASHANIAN, M. ; WILLIAMS, A.: Prediction of Ash Slagging Propensity in a Pulverized Coal Combustion Furnace. In: *Fuel* 101 (2012), S. 171–178
- [116] TAHA, T. J. ; STAM, A. F. ; STAM, K. ; BREM, G.: CFD Modeling of Ash Deposition for Co-Combustion of MBM with Coal in a Tangentially Fired Utility Boiler. In: *Fuel Processing Technology* 114 (2013), S. 126–134
- [117] MUELLER, C. ; SKRIFVARS, B.-J. ; BACKMAN, R. ; HUPA, M.: Ash Deposition Prediction in Biomass Fired Fluidised Bed Boilers – Combination of CFD and Advanced Fuel Analysis. In: *Progress in Computational Fluid Dynamics* 3 (2003), Nr. 2-4, S. 112–120
- [118] KÆR, S. K. ; ROSENDAHL, L. A. ; BAXTER, L. L.: Extending the Capability of CFD Codes to Assess Ash Related Problems in Biomass Fired Boilers. In: *ACS Division of Fuel Chemistry, Preprints* 49 (2004)
- [119] WALSH, P. M. ; SAYRE, A. N. ; LOEHDEN, D. O. ; MONROE, L. S. ; BEÉR, J. M. ; SAROFIM, A. F.: Deposition of Bituminous Coal Ash on an Isolated Heat Exchanger Tube: Effects of Coal Properties on Deposit Growth. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 16 (1990), S. 327–346
- [120] FORSTNER, M. ; HOFMEISTER, G. ; JÖLLER, M. ; DAHL, J. ; BRAUN, M. ; KLEDITZSCH, S. ; SCHARLER, R. ; OBERNBERGER, I.: CFD Simulation of Ash Deposit Formation in Fixed Bed Biomass Furnaces and Boilers. In: *Progress in Computational Fluid Dynamics* 6 (2006), Nr. 4, S. 248–261
- [121] GARBA, M. U. ; INGHAM, D. B. ; MA, L. ; PORTER, R. T. J. ; POURKASHNIAN, M. ; TAN, H. Z. ; WILLIAMS, A.: Prediction of Potassium Chloride Sulfation and Its Effect on Deposition in Biomass-Fired Boilers. In: *Energy and Fuels* 26 (2012), S. 6501–6508

- [122] PLANKENBUEHLER, T. ; MÜLLER, D. ; KARL, J.: *FuelBand – Erweiterung des Brennstoffbandes moderner Biomassefeuerungen*. Abschlussbericht (FKZ: 03KB069), Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, Lehrstuhl für Energieverfahrenstechnik, 2015
- [123] ANSYS INC.: *Ansys Fluent Theory Guide, Release 15.0*, 2014
- [124] SOMMERFELD, M.: Theoretical and Experimental Modelling of Particulate Flows: Overview and Fundamentals Part I and II. In: *Lecture Series 2000-06* (2000)
- [125] ZHU, H. P. ; ZHOU, Z. Y. ; YANG, R. Y. ; YU, A. B.: Discrete Particle Simulation of Particulate Systems: Theoretical Developments. In: *Chemical Engineering Science* 62 (2007), S. 3378–3396
- [126] MORSI, S. A. ; ALEXANDER, A. J.: An Investigation of Particle Trajectories in Two-Phase Flow Systems. In: *Journal of Fluid Mechanics* 55 (1972), S. 193–208
- [127] DI RENZO, A. ; DI MAIO, F. P.: Comparison of Contact-Force Models for the Simulation of Collisions in DEM-based Granular Flow Codes. In: *Chemical Engineering Science* 59 (2004), S. 525–541
- [128] KRUGGEL-EMDEN, H. ; SIMSEK, E. ; RICKELT, S. ; WIRTZ, S. ; SCHERER, V.: Review and Extension of Normal Force Models for the Discrete Element Method. In: *Powder Technology* 171 (2007), S. 157–173
- [129] KRUGGEL-EMDEN, H. ; WIRTZ, S. ; SCHERER, V.: A Study on Tangential Force Laws Applicable to the Discrete Element Method (DEM) for Materials with Viscoelastic or Plastic Behavior. In: *Chemical Engineering Science* 63 (2008), S. 1523–1541
- [130] LUDING, S.: Cohesive, Frictional Powders: Contact Models for Tension. In: *Granular Matter* 10 (2008), S. 235–246
- [131] TSUJI, Y. ; KAWAGUCHI, T. ; TANAKA, T.: Discrete Particle Simulation of Two-Dimensional Fluidized Bed. In: *Powder Technology* 77 (1993), S. 79–87

-
- [132] KANSA, E. J. ; PERLEE, H. E. ; CHAIKEN, R. F.: Mathematical Model of Wood Pyrolysis Including Internal Forced Convection. In: *Combustion and Flame* 29 (1977), S. 311–324
- [133] GRØNLI, M. G. ; MELAAEN, M. C.: Mathematical Model for Wood Pyrolysis - Comparison of Experimental Measurements with Model Predictions. In: *Energy and Fuels* 14 (2000), S. 791–800
- [134] GNIELINSKI, V.: Wärme- und Stoffübertragung in Festbetten. In: *Chemie Ingenieur Technik* 52 (1980), Nr. 3, S. 228–236
- [135] HOBBS, M. L. ; RADULOVIC, P. T. ; SMOOT, L. D.: Combustion and Gasification of Coals in Fixed-Beds. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 19 (1983), S. 505–586
- [136] KLASON, T. ; BAI, X. S. ; BAHADOR, M. ; NILSSON, T. K. ; SUNDÈN, B.: Investigation of Radiative Heat Transfer in Fixed Bed Biomass Furnaces. In: *Fuel* 87 (2008), S. 2141–2153
- [137] BAEHR, H. D. ; STEPHAN, K.: *Wärme- und Stoffübertragung*. 9. Auflage. Springer-Verlag, 2016
- [138] GNIELINSKI, V.: Gleichungen zur Berechnung des Wärme- und Stoffaustausches in durchströmten ruhenden Kugelschüttungen bei mittleren und großen Pecletzahlen. In: *Verfahrenstechnik* 12 (1978), Nr. 6, S. 363–367
- [139] GNIELINSKI, V.: Berechnung des Wärme- und Stoffaustauschs in durchströmten ruhenden Schüttungen. In: *Verfahrenstechnik* 16 (1982), Nr. 1, S. 36–39
- [140] HAYES, R. E. ; KOLACZKOWSKI, S. T.: *Introduction to Catalytic Combustion*. Gordon and Breach Science Publishers, 1997
- [141] BIRD, R. B. ; STEWART, W. E. ; LIGHTFOOT, E. N.: *Transport Phenomena*. 2. Auflage. John Wiley, 2002
- [142] WELTY, J. R. ; WICKS, C. E. ; WILSON, R. E. ; RORRER, G. L.: *Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer*. 5. Auflage. John Wiley and Sons, Inc., 2008

- [143] ZOBEL, N.: *The Representative Particle Model*, Technische Universität Berlin, Dissertation, 2007
- [144] HABERLE, I. ; HAUGEN, N. E. L. ; SKREIBERG, Ø.: Drying of Thermally Thick Wood Particles: A Study of the Numerical Efficiency, Accuracy, and Stability of Common Drying Models. In: *Energy and Fuels* 31 (2017), S. 13743–13760
- [145] CHAN, W.-C. R. ; KELBON, M. ; KRIEGER, B. B.: Modelling and Experimental Verification of Physical and Chemical Processes During Pyrolysis of a Large Biomass Particle. In: *Fuel* 64 (1985), Nr. 11, S. 1505–1513
- [146] PETERS, B. ; SCHRÖDER, E. ; BRUCH, C. ; NUSSBAUMER, T.: Measurements and Particle Resolved Modelling of Heat-Up and Drying of a Packed Bed. In: *Biomass and Bioenergy* 23 (2002), S. 291–306
- [147] BELLAIS, M.: *Modelling of the Pyrolysis of Large Wood Particles*, KTH - Royal Institute of Technology (Sweden), Dissertation, 2007
- [148] MAHMOUDI, A. H. ; HOFFMANN, F. ; PETERS, B.: Semi-Resolved Modeling of Heat-Up, Drying and Pyrolysis of Biomass Solid Particles as a New Feature in XDEM. In: *Applied Thermal Engineering* 93 (2016), S. 1091–1104
- [149] WURZENBERGER, J. C. ; WALLNER, S. ; RAUPENSTRAUCH, H. ; KHINAST, J. G.: Thermal Conversion of Biomass: Comprehensive Reactor and Particle Modeling. In: *AIChE Journal* 48 (2002), Nr. 10, S. 2398–2411
- [150] HAGGE, M. J.: *A Numerical Model for Biomass Pyrolysis*, Iowa State University, Dissertation, 2005
- [151] ZHOU, H. ; JENSEN, A. D. ; GLARBORG, P. ; JENSEN, P. A. ; KAVALIAUSKAS, A.: Numerical Modeling of Straw Combustion in a Fixed Bed. In: *Fuel* 84 (2005), S. 389–403
- [152] DI BLASI, C.: Dynamic Behaviour of Stratified Downdraft Gasifiers. In: *Chemical Engineering Science* 55 (2000), S. 2931–2944
- [153] DI BLASI, C.: Modeling and Simulation of Combustion Processes of Charring and Non-Charring Solid Fuels. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 19 (1993), S. 71–104

-
- [154] THURNER, F. ; MANN, U.: Kinetic Investigation of Wood Pyrolysis. In: *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* 20 (1981), S. 482–488
- [155] MILLER, R. S. ; BELLAN, J.: A Generalized Biomass Pyrolysis Model Based on Superimposed Cellulose, Hemicellulose and Lignin Kinetics. In: *Combustion Science and Technology* 126 (1997), S. 97–137
- [156] BRANCA, C. ; ALBANO, A. ; DI BLASI, C.: Critical Evaluation of Global Mechanisms of Wood Devolatilization. In: *Thermochimica Acta* 429 (2005), S. 133–141
- [157] RANZI, E. ; CUOCI, A. ; FARAVELLI, T. ; FRASSOLDATI, A. ; MIGLIAVACCA, G. ; PIERUCCI, S. ; SOMMARIVA, S.: Chemical Kinetics of Biomass Pyrolysis. In: *Energy and Fuels* 22 (2008), S. 4292–4300
- [158] MELLIN, P. ; KANTARELIS, E. ; YANG, W.: Computational Fluid Dynamics Modeling of Biomass Fast Pyrolysis in a Fluidized Bed Reactor, Using a Comprehensive Chemistry Scheme. In: *Fuel* 117 (2014), S. 704–715
- [159] DI BLASI, C.: Modeling Chemical and Physical Processes of Wood and Biomass Pyrolysis. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 34 (2008), S. 47–90
- [160] THUNMAN, H. ; NIKLASSON, F. ; JOHNSON, F. ; LECKNER, B.: Composition of Volatile Gases and Thermochemical Properties of Wood for Modeling of Fixed or Fluidized Beds. In: *Energy and Fuels* 15 (2001), S. 1488–1497
- [161] RATH, J. ; STAUDINGER, G.: Cracking Reactions of Tar From Pyrolysis of Spruce Wood. In: *Fuel* 80 (2001), S. 1379–1389
- [162] PAULASKAS, R.: *Investigation of Pelletized Biomass Thermal Deformations During Pyrolysis*, Kaunas University of Technology, Dissertation, 2017
- [163] EVANS, D. D. ; EMMONS, H. W.: Combustion of Wood Charcoal. In: *Fire Research* 1 (1977), S. 57–66
- [164] SCHARLER, R. ; FLECKL, T. ; OBERNBERGER, I.: Modifikation des Magnussen-Parameters des Eddy Dissipation Models für Biomasse-Rostfeuerungen mittels Heißgas-in-situ Absorptionsspektroskopie. In: *Verbrennung und Feuerungen: 20. Deutscher Flammentag* (2001), S. 509–514

- [165] MENTER, F. R.: Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications. In: *AIAA Journal* 32 (1994), Nr. 8, S. 1598–1605
- [166] DRYER, F. L. ; GLASSMAN, I.: High-Temperature Oxidation of CO and CH₄. In: *Symposium (International) on Combustion* 14 (1973), Nr. 1, S. 987–1003
- [167] BRYDEN, K. M. ; RAGLAND, K. W.: Numerical Modeling of a Deep, Fixed Bed Combustor. In: *Energy and Fuels* 10 (1996), S. 269–275
- [168] MAGNUSSEN, B. F. ; HJERTAGER, B. H.: On Mathematical Models of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. In: *Symposium (International) on Combustion* Bd. 16, 1976, S. 719–729
- [169] YIN, C.: On Gas and Particle Radiation in Pulverized Fuel Combustion Furnaces. In: *Applied Energy* 157 (2015), S. 554–561
- [170] SREEDHARAN, S. S. ; TAFTI, D. K.: Composition Dependent Model for the Prediction of Syngas Ash Deposition in Turbine Gas Hotpath. In: *International Journal of Heat and Fluid Flow* 32 (2011), S. 201–211
- [171] SENIOR, C. L. ; SRINIVASACHAR, S.: Viscosity of Ash Particles in Combustion Systems for Prediction of Particle Sticking. In: *Energy and Fuels* 9 (1995), S. 277–283
- [172] YIN, C. ; LUO, Z. ; NI, M. ; CEN, K.: Predicting Coal Ash Fusion Temperature with a Backpropagation Neural Network Model. In: *Fuel* 77 (1998), Nr. 15, S. 1777–1782
- [173] LANZERSTORFER, C.: Chemical Composition and Physical Properties of Filter Fly Ashes From Eight Grate-Fired Biomass Combustion Plants. In: *Journal of Environmental Science* 30 (2015), S. 191–197
- [174] FATEHI, H. ; BAI, X. S.: Comprehensive Mathematical Model for Biomass Combustion. In: *Combustion Science and Technology* 186 (2014), S. 574–593
- [175] MARKOVIC, M. ; BRAMER, E. A. ; BREM, G.: Experimental Investigation of Wood Combustion in a Fixed Bed with Hot Air. In: *Waste Management* 34 (2014), S. 49–62

- [176] VEREIN DEUTSCHER INGENIEURE (Hrsg.): *VDI-Wärmeatlas*. 10. Auflage. Springer-Verlag, 2006

Anhang

A-1 Pyrolysemodell

Eine Besonderheit der in Kapitel 6.2 vorgestellten Validierungsrechnungen liegt darin, dass Selbstzündungsprozesse unter typischen Primärlufttemperaturen eine zentrale Rolle einnehmen. Entscheidend für den Beginn und Fortschritt der Verbrennung ist in dieser Situation eine ausreichend schnelle Brennstoffpyrolyse, die zur Freisetzung brennbarer Gasspezies führt. Bereits unter Kapitel 5.2.5 wurde jedoch angemerkt, dass das verwendete Pyrolysemodell unter den vorhandenen Temperaturen zu langsam agiert, um dies zu gewährleisten. Aus diesem Grund wurde das Pyrolysemodell nachträglich adaptiert. Die Anpassung der kinetischen Daten beschränkt sich dabei auf den Zerfall der Hemicellulose, welcher bei den vorhandenen Temperaturen ausschlaggebend ist. Die Optimierung der Kinetikdaten erfolgte auf der Grundlage experimenteller DTG-Kurven [156] zur Pyrolyse unbehandelten Buchenholzes bei hohen Heizraten ($80 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$). Die Optimierung des Datensatzes wurde in MATLAB vorgenommen und basiert auf dem Nelder-Mead Simplex Verfahren. Die angepassten Kinetikdaten sowie Originalwerte sind in Tab. A-1 dargestellt.

Tab. A-1: Modellparameter für die Pyrolyse der Hemicellulose

	Original [155]		Adaptiert	
Reaktion	$A \text{ [s}^{-1}\text{]}$	$E_a \text{ [} 10^8 \text{ J kmol}^{-1}\text{]}$	$A \text{ [s}^{-1}\text{]}$	$E_a \text{ [} 10^8 \text{ J kmol}^{-1}\text{]}$
$\dot{r}_{H,1}$	$2,10 \cdot 10^{16}$	1,867	$3,90 \cdot 10^{18}$	1,840
$\dot{r}_{H,2}$	$8,75 \cdot 10^{15}$	2,024	$5,53 \cdot 10^{14}$	1,890
$\dot{r}_{H,3}$	$2,60 \cdot 10^{11}$	1,457	$2,26 \cdot 10^6$	0,892

In Abbildung A-1 ist die Pyrolyserate des Holzes mit ursprünglichem und angepasstem Datensatz veranschaulicht. Wie aus der Darstellung hervorgeht, resultiert die neue Reaktionskinetik der Hemicellulose in einer insgesamt längeren Umsatzdauer, wobei die Umwandlung bereits bei geringeren Temperaturen (ab $200 \text{ }^\circ\text{C}$) einsetzt. Für die in Kapitel 6.2 vorherrschende Verbrennungslufttemperatur von $250 \text{ }^\circ\text{C}$ ist die Pyrolyserate gegenüber dem Original etwa um eine Größenordnung erhöht, was

zu einer hinreichenden Freisetzung brennbarer Verbindungen, wie H_2 , Teer, CH_4 und CO führt und damit die Verbrennung einleitet.

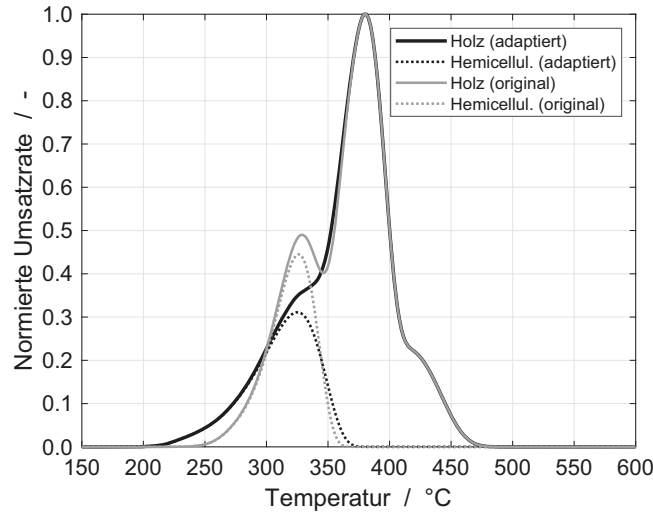


Abb. A-1: Pyrolyserate von Holz mit originalen Kinetikparametern [155] und mit adaptierten Werten für Hemicellulose

A-2 Depositionsmodell

Innerhalb des in Kapitel 5.5 vorgestellten Ablagerungsmodells müssen die empirischen und von der Aschekomposition abhängigen Modellgrößen A_{Asche} und B_{Asche} bestimmt werden. Für jene gelten nach [170] die folgenden Beziehungen

$$A_{\text{Asche}} = \max(A_H, A_L) \quad \text{und} \quad B_{\text{Asche}} = \max(B_H, B_L) . \quad (\text{A-1})$$

A_H ist weiterhin gegeben mit

$$A_H = -3,81629 - 0,46341 \cdot B_{\text{Asche}} - 0,35342 \cdot x_{\text{NBO/T}} , \quad (\text{A-2})$$

wobei das Verhältnis $x_{\text{NBO/T}}$ wie folgt berechnet werden kann

$$x_{\text{NBO/T}} = \frac{x_{\text{CaO}} + x_{\text{MgO}} + x_{\text{FeO}} + x_{\text{Na}_2\text{O}} + x_{\text{K}_2\text{O}} - x_{\text{Al}_2\text{O}_3} - x_{\text{Fe}_2\text{O}_3}}{\frac{x_{\text{SiO}_2} + x_{\text{TiO}_2}}{2} + x_{\text{Al}_2\text{O}_3} + x_{\text{Fe}_2\text{O}_3}} . \quad (\text{A-3})$$

Hier bezeichnen x_{CaO} , x_{MgO} , etc. die Molenanteile relevanter Aschespezies. Des Weiteren wird die Modellgröße A_L mit Hilfe der nachfolgenden Beziehungen bestimmt.

$$A_L = \begin{cases} -1,982 - 0,902473 \cdot B_{\text{Asche}} & , 1,3 \leq x_{\text{NBO/T}} \\ 1,478718 - 0,902473 \cdot B_{\text{Asche}} - 2,662091 \cdot x_{\text{NBO/T}} & , 0,2 \leq x_{\text{NBO/T}} < 1,3 \\ 8,223 - 0,902473 \cdot B_{\text{Asche}} - 36,3835 \cdot x_{\text{NBO/T}} & , 0,0 \leq x_{\text{NBO/T}} < 0,2 \\ 8,223 - 0,902473 \cdot B_{\text{Asche}} - 0,35342 & , x_{\text{NBO/T}} < 0,0 \end{cases} \quad (\text{A-4})$$

Die Modellgröße B_H für hohe Temperaturen ist durch den nachstehenden Ausdruck gegeben.

$$B_H = b_0 + b_1\alpha_1 + b_2\alpha_1^2 + \alpha_2(b_3 + b_4\alpha_1 + b_5\alpha_1^2) + \alpha_2^2(b_6 + b_7\alpha_1 + b_8\alpha_1^2) + \alpha_2^3(b_9 + b_{10}\alpha_1 + b_{11}\alpha_1^2) \quad (\text{A-5})$$

Die hierbei benötigten Koeffizienten b_0 bis b_{11} sind in Tabelle A-2 aufgeführt.

Tab. A-2: Konstanten des Ablagerungsmodells

Koeffizient	Hochtemperatur	Niedertemperatur
b_0	-224,98	-7563,46
b_1	636,67	24431,69
b_2	-418,70	-17685,40
b_3	823,89	32644,26
b_4	-2398,32	-103681,00
b_5	1650,56	74541,33
b_6	-957,94	-46484,80
b_7	3366,61	146008,40
b_8	-2551,71	-104306,00
b_9	387,32	21904,63
b_{10}	-1722,24	98194,80
b_{11}	1432,08	48429,31

Die Modellgröße B_L wird in Analogie zu B_H und mit Hilfe der Koeffizienten für geringe Temperaturen aus Tabelle A-2 berechnet. Abschließend gilt für die Größe $\alpha_1 = x_{\text{CaO}}/(x_{\text{CaO}} + x_{\text{Al}_2\text{O}_3})$ und α_2 entspricht dem Molenanteil von SiO_2 .

A-3 Verwendete Makros

Die nachfolgende Tabelle A-3 enthält eine Auflistung zentraler Makros/Funktionen von ANSYS Fluent, die zur Umsetzung des CFD-DEM-Konzeptes genutzt worden sind.

Tab. A-3: Hauptmakros zur Umsetzung des Simulationskonzeptes

Bezeichnung	Verwendung/Zweck
DEFINE_DPM_BC	Einbindung des Ablagerungsmodells, Vorgabe von Randbedingungen zur Behandlung von Partikeln an den Systemgrenzen
DEFINE_DPM_BODY_FORCE	Berechnung von Kontaktkräften an einer Symmetrieebene auf Basis des in Kapitel 5.1.3 vorgestellten linearen Feder-Dämpfer Modells, Grundlage zur Verwendung eines symmetrischen Kesselmodells
DEFINE_DPM_HEAT_MASS	Enthält den Kern des Partikelmodells, inklusive der in Abbildung 5.5 dargestellten Teilprozesse
DEFINE_DPM_PROPERTY	Berechnung und Übergabe relevanter Partikeleigenschaften, wie z. B. Partikeldichte
DEFINE_SOURCE	Quellterme zur Behandlung der Wärmeauskopplung an den Überhitzerblöcken
DEFINE_PROFILE	Vorgabe von Geschwindigkeits-, Spezies- und Temperaturprofilen an Systemeintritten

A-4 Überhitzermodell

Die im dritten Rauchgaszug der Referenzanlage eingebauten Überhitzer werden, wie bereits zuvor unter Abschnitt 7.2 erwähnt, als poröse Medien behandelt. Innerhalb des in ANSYS Fluent dafür vorgesehenen Modells wird der Einfluss des porösen Mediums auf die Strömung durch einen zusätzlichen Quellterm in den Impulsbilanzen berücksichtigt. Dieser besitzt nach [123] die Form

$$\vec{F}_{\text{pm}} = - \left(\frac{\mu_{\text{f}}}{\alpha_{\text{pm}}} \vec{v}_{\text{f}} + C_{\text{pm}} \frac{\rho_{\text{f}}}{2} |\vec{v}_{\text{f}}| \vec{v}_{\text{f}} \right). \quad (\text{A-6})$$

Hier bezeichnen α_{pm} und C_{pm} die Permeabilität der Rohrbündelwärmeübertrager sowie deren Trägheitsverlustfaktor.

Um die Wärmeauskopplung an den Wasser-Dampf-Kreislauf zu berücksichtigen, wurde in das Modell eine Wärmesenke implementiert. Hierzu dient eine Wärmedurchgangsberechnung. Der die Wärmeübertragung limitierende Wärmeübergangskoeffizient auf der Rauchgasseite wird in Analogie zu Gleichung 5.25 ermittelt, wobei der äußere Überhitzerrohrdurchmesser d_r als charakteristische Länge eingesetzt wird. Die Bestimmung der Nusselt-Zahl basiert auf empirischen Korrelationen aus dem VDI-Wärmeatlas für querangeströmte Rohrbündelwärmeübertrager [176].

$$Nu = f_a Nu_{\text{Rohr}} \quad (\text{A-7})$$

$$Nu_{\text{Rohr}} = 0,3 + \sqrt{Nu_{\text{Lam}}^2 + Nu_{\text{Turb}}^2} \quad (\text{A-8})$$

$$Nu_{\text{Lam}} = 0,664 \sqrt{Re_r} \sqrt[3]{Pr} \quad (\text{A-9})$$

$$Nu_{\text{Turb}} = \frac{0,037 Re_r^{0,8} Pr}{1 + 2,443 Re_r^{-0,1} (Pr^{2/3} - 1)} \quad (\text{A-10})$$

Hierbei ist Re_r die charakteristische Reynolds-Zahl, welche laut Gleichung A-11 mit Hilfe der Leerrohrgeschwindigkeit $v_{f,\text{leer}}$, dem Rohrdurchmesser d_r , der Porosität des Rohrbündels ϵ_r sowie Dichte und dynamischer Viskosität des Gases bestimmt wird.

$$Re_r = \frac{\rho_f d_r v_{f,\text{leer}}}{\epsilon_r \mu_f} \quad (\text{A-11})$$

Wissenschaftlicher Werdegang

17.04.1990	Geboren in Waren (Müritz)
07/2008	Allgemeine Hochschulreife, Richard-Wossidlo-Gymnasium Waren (Müritz)
10/2008 - 09/2011	Bachelorstudium des Maschinenbaus, Universität Rostock Vertiefung: „Energie- und Umwelttechnik“
10/2011 - 11/2013	Masterstudium des Maschinenbaus, Universität Rostock Vertiefung: „Thermische Maschinen/Verbrennungsmotoren und Strömungsmaschinen“
12/2013 - 09/2019	Wissenschaftlicher Mitarbeiter und Promotionsstudent am Lehrstuhl Technische Thermodynamik, Universität Rostock Forschungsthemen: Numerische Untersuchung von Heizsystemen für mobile Anwendungen, CFD-DEM Simulationen von Biomasse- und Müllverbrennung in Wirbelschichten und Rostfeuerungen
03/2018 - 01/2019	Forschungsingenieur am Forschungszentrum für Verbrennungsmotoren und Thermodynamik Rostock GmbH Forschungsthema: Simulation von Ablagerungsbildung in motorischen Abgasnachbehandlungssystemen
seit 02/2019	Teamleiter Partikelsimulation am Forschungszentrum für Verbrennungsmotoren und Thermodynamik Rostock GmbH
seit 10/2019	Oberingenieur am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, Universität Rostock

Auszeichnungen

11/2014	VDI-Studienpreis Mecklenburg-Vorpommern 2014
---------	--